Interferometrische Konzentrations- und Temperaturmessungen in einer laminaren Diffusionsflamme

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur
genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau
der Ruhr-Universität Bochum

von
Dipl.-Ing. Dieter Stirnberg
Münster

Bochum 1982

Digitized by the Internet Archive
in 2026

https://archive.org/details/IA41547222_0054

Interferometrische Konzentrations- und Temperaturmessungen in einer laminaren Diffusionsflamme

Dissertation
zur Erlangung des akademischen Grades
Doktor-Ingenieur
genehmigt von der Fakultät für Maschinenbau
der Ruhr-Universität Bochum

von
Dipl.-Ing. Dieter Stirnberg
Münster

Bochum 1982

UNIV.
LEIDEN
BIBL.

Doktorarbeit eingereicht am: 13.1.1982

Tag der mündliche Prüfung: 10.3.1982

Referent: Prof. Dr. rer. nat W. Merzkirch
Korreferenten: Prof. Dr.-Ing. H. Kremer
Prof. Dr.-Ing. N. Peters

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit in der Arbeitsgruppe Experimentelle Gasdynamik am Institut für Thermo- und Fluiddynamik der Ruhr-Universität Bochum.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof.Dr.rer.nat.W. Merzkirch, der diese Arbeit angeregt und durch seine wohlwollende Betreuung zu ihrem Gelingen beigetragen hat.

Herrn Prof.Dr.-Ing.N.Peters von der RWTH-Aachen möchte ich herzlich für die Übernahme eines Korreferates und die Mühe und Zeit danken, die er als immer zugänglicher Ratgeber während der Entstehung der Arbeit aufgewendet hat.

Bei Herrn Prof.Dr.-Ing.H.Kremer möchte ich mich für die Übernahme eines Korreferates bedanken.

An dieser Stelle spreche ich auch allen Mitarbeitern des Institutes meinen Dank aus, die mich bei der Arbeit unterstützt haben. Dabei denke ich besonders an Frau Ing.grad E.Ronkholz, die die Messungen mit dem Laser-Doppler-Anemometer durchgeführt hat.

Inhaltverzeichnis

		Seite
1.	Einleitung	1
2.	Grundgleichungen	7
2.1	Physikalische Anfangs- und Randbedingungen	10
3.	Stoffwerte	13
4.	Der Mischungsgrad f	17
5.	Bestimmung der Konzentrationen und der Temperatur aus dem Brechungsindex	23
5.1	Konzentrationen im isothermen Mehrkomponenten-Freistrahl	23
5.1.1	Herleitung unter Verwendung des Mischungsgrades f	23
5.1.2	Herleitung unter Betrachtung eines Zweistoff-Modells	28
5.2	Konzentrationen und Temperatur in der H_2-Luft Diffusionsflamme	30
5.2.1	Das Flammenflächenmodell	30
5.2.2	Die implizite Beziehung n-1=f(f)	36
6.	Theoretische Berechnungen	46
6.1	Transformation des Gleichungssystems	47
6.1.1	Eigenschaften der Transformation	48

6.2	Berechnung des Mehrkomponenten-Freistrahls mit polynärer Diffusion und Auftrieb	51
6.2.1	Transformierte Gleichungen sowie Anfangs- und Randbedingungen	51
6.2.2	Diskretisierung des Gleichungssystems	56
6.2.3	Lösung des algebraischen Gleichungssystems	64
6.2.4	Der Lösungsalgorithmus	67
6.3	Berechnung der H_2-Luft Diffusionsflamme	70
6.3.1	Transformierte Gleichungen sowie Anfangs- und Randbedingungen	70
6.3.2	Finite Gleichungen	74
6.3.3	Der Lösungsalgorithmus	75
7.	Experimentelle Untersuchungen	79
7.1	Versuchsaufbau	79
7.2	Interferometrische Messungen des Brechungsindex	81
7.2.1	Das Mach-Zehnder Interferometer	81
7.2.2	Auswertung des Interferogramms eines rotationssymmetrischen Dichtefeldes	83
7.3	Geschwindigkeitsmessungen mit dem Laser-Doppler-Anemometer	92

8. Ergebnisse und Diskussion 95

8.1 Untersuchung des Ähnlichkeitsverhaltens der numerischen Lösungen 95

8.2 Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Geschwindigkeitsprofilen des H_2-Luft Freistrahls 107

8.3 Ergebnisse der H_2-Luft Diffusionsflamme 112

8.3.1 Vergleich der berechneten und gemessenen Geschwindigkeitsprofile 113

8.3.2 Berechnete Konzentrations-, Temperatur- und Brechungsindexprofile 116

8.3.3 Einfluß der Annahmen gleicher Diffusionskoeffizienten und Le = 1 129

8.3.4 Ermittlung der Konzentrationen und Temperatur aus den berechneten Brechungsindexprofilen als qualitativer Test des Auswerteverfahrens 136

8.3.5 Interferometrisch gemessene Konzentrations- und Temperaturprofile 142

8.4 Schlußfolgerungen 147

9. Zusammenfassung 149

10. Literaturverzeichnis 152

11. Die wichtigsten Bezeichnungen 159

12. Anhang: Einzelheiten zur numerischen Rechnung 163

1. Einleitung

Flammen sind in der Geschichte der Interferometrie häufig als Untersuchungsobjekt gewählt worden. Meistens wurden die Interferogramme von Flammen allerdings nur zur sinnfälligen Demonstration des Prinzips der Interferometrie benutzt (z.B. [1],[2]). Auch gab es Versuche qualitativer Interpretation z.B. durch die Annahme, daß das Interferogramm einer Flamme hauptsächlich durch das Temperaturfeld bestimmt wird [3]. Eine quantitative Auswertung mit dem Ziel die Temperatur und den Anteil des umgesetzten Brennstoffs zu bestimmen, haben F.Schulz-Grunow und G. Wortberg [4] für eine einfache flache Methan-Luft Vormischflamme durchgeführt. Die Bestimmung der Konzentrationen der chemischen Komponenten und der Temperatur aus dem Interferogramm einer Flamme mit komplizierterer Geometrie und beliebigem Brennstoff ist bisher noch nicht realisiert worden.

Ein Grund für die verhältnismäßig geringe Zahl quantitativer Flammenmessungen liegt darin, daß ein Interferogramm ein zweidimensionales Bild ist, während die meisten Flammen dreidimensional sind. Deshalb ist die Bestimmung des Brechungsindex, der einzigen Größe, die direkt aus einem Interferogramm ermittelt werden kann, ohne größeren Aufwand nur für zweidinemsionale oder rotationssymmetrische, d.h. quasizweidimensionale Flammen möglich. Zwar ist prinzipiell auch die Brechungsindexverteilung eines dreidimensionalen Objekts interferometrisch bestimmbar. Die dabei anzuwendenden Verfahren [5], [6] sind jedoch sehr aufwendig, da sie die Auswertung einer Vielzahl von Interferogrammen des Objekts verlangen, die jeweils unter einem anderen Winkel aufgenommen werden müssen. Deshalb ist eine Beschränkung der Untersuchung auf rotationssymmetrische Flammen sinnvoll. Dies bedeutet jedoch, daß die meisten technischen Flammen von der Untersuchung aus-

geschlossen sind, und impliziert auch die Forderung nach laminarer Strömung, da eine turbulente Flamme die Bedingung strenger Rotationssymmetrie nicht zu erfüllen vermag.

Der Brechungsindexverlauf einer laminaren, rotationssymmetrischen Flamme kann also relativ einfach aus einem Interferogramm bestimmt werden. Die eigentliche Schwierigkeit besteht aber in dem Problem, vom lokalen Brechungsindex auf die Konzentrationen der chemischen Komponenten und die Temperatur zu schließen. Zur Erläuterung soll das Gladstone-Dale-Gesetz [7] herangezogen werden

$$n-1 = k \cdot \rho \qquad (1.1)$$

wonach der Brechungsindex n proportional zur Gemischdichte ρ ist, mit der Gladstone-Dale Konstante k als Proportionalitätskonstanten. Nimmt man ferner an, daß die Gemischkomponenten sich wie ideale Gase verhalten, dann kann ρ durch das ideale Gas Gesetz ausgedrückt werden und man erhält

$$n-1 = \frac{p\,k}{T\,\frac{R}{\bar{M}}} \qquad (1.2)$$

Aus dieser Gleichung kann im isobaren Fall die Temperatur T sofort als alleinige Funktion von (n-1) berechnet werden, wenn die Größen k und $\bar{M}$ sich in der gesamten Flamme, also auch vor, während und nach der chemischen Reaktion, nicht ändern. Letzteres ist bei einer äquimolaren Reaktion erfüllt, weil die Gladstone-Dale Konstante vom Molekulargewicht des Gemisches und von der Polarisierbarkeit der Atome abhängt, nicht jedoch von deren chemischer Bindung (siehe [8], [7]). F. Schultz-Grunow und G. Wortberg [4] wählten deshalb für die flache eindimensionale Vormischflamme Methan als Brennstoff, bei dessen Reaktion sich die Zahl der Mole nicht ändert. Wählt man jedoch eine Reaktion, bei der die Zahl der Mole vor und nach der Verbrennung nicht gleich ist, oder läßt man zu, daß das Molekulargewicht des Gasgemisches sich durch Diffusion z.B. eines Inertgas in die Flamme ändert, dann muß man die Konzentrationsabhängigkeit des Brechungsindex und des Molekulargewichtes $\bar{M}$ bzw. der Gaskomponenten R des Gemisches berücksichtigen.

$$k = \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, k_i \tag{1.3}$$

$$R = \frac{\bar{R}}{\bar{M}} = \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, R_i \tag{1.4}$$

Damit erhält man aus Gleichung (1.2)

$$n-1 = \frac{p \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, k_i}{T \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, R_i} \tag{1.5}$$

Mit dieser Gleichung und der zusätzlich geltenden Beziehung

$$\sum_{i=1}^{n_K} Y_i = 1 \tag{1.6}$$

stehen zwei Gleichungen zur Verfügung, mit denen man allenfalls die Konzentrationen eines isothermen, binären Gasgemisches aus einem interferometrisch gemessenen (n-1)-Wert bestimmen kann, wie dies auch in Abschnitt 5.1.2 für einen Quasi-Zweikomponenten-Freistrahl geschieht. Für die Konzentrationen und die Temperatur einer Flamme reichen diese beiden Gleichungen nicht aus.

Eine Möglichkeit zur Lösung dieses Schließungsproblems besteht darin, mehrere Interferogramme bei jeweils unterschiedlichen Lichtwellenlängen von der Flamme anzufertigen. Da der Brechungsindex, wenn auch schwach, von der Lichtwellenlänge abhängt, gibt jedes Interferogramm eine andere Information und das Gladstone-Dale-Gesetz (1.5) kann entsprechend oft angeschrieben werden. Dieses Verfahren wurde von [9] auf ein isothermes Zweikomponenten-

gemisch angewandt. Eine Flamme läßt sich mit diesem Verfahren, wenn überhaupt, nur mit unzureichender Genauigkeit untersuchen, da die Interferogramme sich wegen der geringen Dispersionseigenschaften von Gasen kaum unterscheiden. Die Eignung dieses Verfahrens zur Flammenuntersuchung ließe sich vermutlich erheblich verbessern, wenn man die verschiedenen Lichtwellenlängen in die Nähe der Resonanzlinien der einzelnen Komponenten des Gasgemisches legen würde, wie dies Bershader [10] vorgeschlagen hat. T.P. Pandya und F.J. Weinberg [11] haben die durch Reaktion und Diffusion bedingte Veränderung der Gaszusammensetzung in der Flamme durch einen Korrekturterm bei der Berechnung des Brechungsindex berücksichtigt. Der Korrektur lag der Gedanke zugrunde, daß die Brechungsindexänderung infolge einer veränderten Gaszusammensetzung vom Anteil des schon umgesetzten Brennstoffs (Reaktionszahl) abhängt. Dabei wurde angenommen, daß die Reaktionszahl gleich dem auf die Temperaturdifferenz zwischen Umgebung und Reaktionszone bezogenen Temperaturanstieg $(T-T_\infty)/(T_{st}-T_\infty)$ ist.

In dieser Arbeit wird ein ähnlicher Weg beschritten. Mit Hilfe der Theorie laminarer Diffusionsflammen wird eine Kopplungsbeziehung abgeleitet, die den Brechungsindex eindeutig mit den Konzentrationen und der Temperatur verknüpft. Dies geschieht am Beispiel einer H_2-Luft Diffusionsflamme. Die Herleitung der Kopplungsbeziehung ist aber nur möglich, wenn man die Postulate lokal gleicher Diffusionskoeffizienten der Komponenten und Lewis-Zahl=1 macht. Zudem wird die Gültigkeit des Flammenflächenmodells angenommen. Um den Einfluß der Postulate abzuschätzen, wird die Flamme numerisch berechnet. Bei der Entwicklung des Berechnungsverfahrens der Flamme entsteht als Vorstufe ein Programm zur Berechnung eines vertikalen Mehrkomponenten-Freistrahls mit Diffusion und Auftrieb. Zur Überprüfung der Rechnungen werden Geschwindigkeitsmessungen mit einem Laser-Doppler Anemometer in Flamme und Freistrahl durchgeführt.

Außerdem werden Beziehungen angegeben, mit denen man die Konzentrationen im isothermen Mehrkomponenten-Freistrahl aus dem Brechungsindex ermitteln kann. Diese Voruntersuchungen

am Freistrahl wie auch die numerischen Berechnungen der Diffusionsflamme liefern Informationen über die Qualität des angestrebten Ergebnisses, nämlich der interferometrischen Temperatur- und Konzentrationsbestimmung in der H_2-Luft-Diffusionsflamme.

Überblick

In Kapitel 2 werden die Grenzschichtgleichungen, die den Freistrahl und die Flamme beschreiben, und die physikalischen Anfangs- und Randbedingungen angegeben.

In Kapitel 3 sind die Beziehungen, die zur Bestimmung der Stoffwerte verwendet werden, aufgezählt.

In Kapitel 4 wird eine gemeinsame Lösung (Mischungsgrad f) für die Erhaltungsgleichung der Elemente und der Enthalpie hergeleitet.

In Kapitel 5 werden unter Verwendung des Mischungsgrades für den Mehrkomponenten-Freistrahl und die H_2-Luft Diffusionsflamme die Zusammenhänge entwickelt, die es gestatten, die Konzentrationen und Temperatur aus dem Brechungsindex zu bestimmen.

In Kapitel 6 wird das numerische Berechnungsverfahren des Freistrahls und der Flamme beschrieben.

In Kapitel 7 werden Durchführung und Auswertungsmethoden der experimentellen Untersuchungen dargestellt.

In Kapitel 8 werden die Ergebnisse der theoretischen Berechnungen und experimentellen Untersuchungen in dimensionsloser Darstellung gezeigt und diskutiert.

2. Grundgleichungen

In diesem Kapitel werden die Gleichungen vorgestellt, die die Diffusionsflamme und den Mehrkomponenten-Freistrahl beschreiben. Es handelt sich um Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und Partialmassen der Elemente. Es wird eine laminare, rotationssymmetrische Grenzschichtströmung angenommen. Außerdem wird vorausgesetzt, daß der Druck im gesamten Feld konstant ist und die Dissipation und der Diffusionsthermoeffekt vernachlässigt werden können. Damit lautet das System der Grenzschichtgleichungen in Zylinderkoordinaten (vgl.[12],[13]):

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial z}(\rho u r) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v r) = 0 \qquad (2.1)$$

Impulsgleichung

$$\rho r\left(u\frac{\partial u}{\partial z} + v\frac{\partial u}{\partial r}\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(r\mu \frac{\partial u}{\partial r}\right) + (\rho_\infty - \rho) g r \qquad (2.2)$$

Energiegleichung in Enthalpieform

$$\rho r\left(u\frac{\partial h}{\partial z} + v\frac{\partial h}{\partial r}\right) = - \frac{\partial}{\partial r}(r j_q) \qquad (2.3)$$

mit dem Enthalpiestromvektor j_i (vgl.[14])

$$j_q = - \frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial h}{\partial r} + \sum_{i=1}^{n_K} h_i\left(j_i + \frac{\lambda}{c_p}\frac{\partial Y_i}{\partial r}\right) \qquad (2.4)$$

n_E Elementenerhaltungsgleichungen

$$\rho r\left(u\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial z} + v\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial r}\right) = - \frac{\partial}{\partial r}\left(r \sum_{i=1}^{n_K} \frac{a_{ik} M_k}{M_i} j_i\right) \qquad (2.5$$

$k=1,n_E$

mit dem Diffusionsstromvektor j_i (vgl. [15])

$$j_i = \rho \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n_K} \frac{M_i}{\bar{M}^2} D_{ij} \frac{\partial}{\partial r}(\bar{M} Y_j) - \frac{D_i^T}{T} \frac{\partial T}{\partial r} \qquad (2.6)$$

Der letzte Term der Impulsgleichung (2.2) repräsentiert den Auftrieb, der wegen des großen Dichteunterschiedes zwischen H_2 und Luft von erheblicher Größenordnung ist.

Der Vorteil der Verwendung der Energiegleichung in Enthalpieform (2.3) anstelle der Temperaturform liegt darin, daß erstere keinen Quellterm besitzt. Der Grund dafür ist die Erhaltung der Enthalpie bei einer chemischen Reaktion. Vor der Reaktion liegt die Enthalpie in Form von chemischer Bildungsenthalpie, nach der Reaktion als thermische Energie vor.

Die Elementenerhaltungsgleichung (2.5) drückt aus, daß auch bei einer Reaktion die Masse der einzelnen Atomsorten erhalten bleibt. Die Herleitung dieser Gleichung ist in [16], [17] beschrieben. Bei Anwendung des Flammenflächenmodells (siehe Kap. 5.2.1) läßt sich aus dem Verlauf der Elementenkonzentration sehr einfach die Stelle stöchiometrischer Mischung und damit der Ort der Reaktion bestimmen. Der Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.5) berücksichtigt die durch Diffusion transportierten Atome. Da die Diffusion aber ein molekular kontrollierter Vorgang ist, bestimmt der Quotient hinter dem Summenzeichen den Anteil der k-ten Atomsorte am Diffusionsstrom des i-ten Moleküls. Summiert man die Anteile an allen im System vorkommenden Molekülarten auf, dann erhält man den gesamten "Diffusionsstrom" des Atoms. Der Diffusionsstromvektor j_i berücksichtigt sowohl die polynäre, molekulare Diffusion, als auch die Thermodiffusion.

Das Gleichungssystem wird ergänzt durch Beziehungen , die die Konzentrations- und Temperaturabhängigkeit der Dichte ρ, der Viskosität μ, der Wärmeleitfähigkeit λ, der Wärmekapazität c_p, der polynären Diffusionskoeffizienten D_{ij} und der Thermo-

diffusionskoeffizienten D_i^T beschreiben (siehe Kap. 3.)

Die Unbekannten des Gleichungssystems sind die axialen und radialen Geschwindigkeitskomponenten u und v, die Enthalpie h und die Elementenkonzentrationen $\tilde{y}_k$. Eigentlich interessieren aber die Temperatur T anstelle der Enthalpie und die Konzentrationen Y_i der chemischen Komponenten anstelle der Elementenkonzentrationen. Deshalb kommen noch eine thermodynamische Beziehung zur Bestimmung von T aus h und aus dem Flammenflächenmodell abgeleitete Verknüpfungen hinzu, die es gestatten die Y_i aus den $\tilde{Y}_k$ zu berechnen (siehe Abschn. 5.2.1).

2.1 Physikalische Anfangs- und Randbedingungen

Im Experiment werden der Mehrkomponenten-Freistrahl sowie die H_2-Luft Diffusionsflamme mit einem einzigen Brenner erzeugt. Die Anfangs- und Randbedingungen des Experiments werden auch für die theoretischen Berechnungen übernommen. Der Brenner (Bild 2.1) besteht aus zwei konzentrisch angeordneten Rohren. Aus dem inneren Rohr mit einem Durchmesser von 1o mmbzw. 18mm strömt Wasserstoff, während aus dem äußeren Rohr mit dem Durchmesser von 57 mm ein ringförmiger Luftstrahl in die Umgebung austritt. Die Außenströmung wirkt als Abschirmung gegen kleine Störungen aus der Umgebung und schafft dadurch die Stabilität, die zur Aufnahme der Interferogramme und zur Messung der Geschwindigkeiten notwendig ist. Der Wasserstoff-Freistrahl besitzt beim Austritt ein voll entwickeltes parabolisches Geschwindigkeitsprofil, während das Ringspaltprofil der Außenströmung noch nicht voll ausgebildet ist, wodurch eine Verkleinerung des Lösungsgebietes der theoretischen Rechnungen ermöglicht wird. Dies geschieht durch die Annahme, daß sich die gesamte Umgebung mit der Geschwindigkeit des ebenen Teils des Ringspaltprofiles bewegt und diese Geschwindigkeit als Randwert verwendet werden kann. Messungen haben ergeben, daß in den maximalen Höhen, die in den Rechnungen berücksichtigt wurden, und für die in Frage kommenden Austrittsgeschwindigkeiten der ebene Teil des Profils tatsächlich noch vorhanden ist.

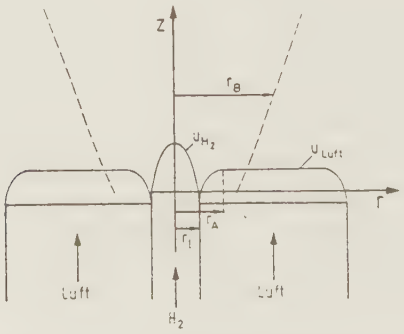


Bild 2.1 Geometrie und Geschwindigkeitsprofile der Strömung

Die Anfangsbedingungen lauten für den Bereich zwischen der Symmetrieachse und dem Rand r_I des inneren Rohres:

$z = 0$

$0 \leq r \leq r_I$

$$u = u_o\left(1 - \left(\frac{r}{r_I}\right)^2\right) \qquad (2.7)$$

$$Y_{H_2} = \tilde{Y}_H = 1 \qquad (2.8)$$

$$Y_{O_2} = \tilde{Y}_O = 0 \qquad (2.9)$$

$$Y_{N_2} = \tilde{Y}_N = 0 \qquad (2.10)$$

$$Y_{H_2O} = 0 \qquad (2.11)$$

$$h = h^o_{H_2,\ 298} \qquad (2.12)$$

Gleichung (2.7) gibt das parabolische Geschwindigkeitsprofil vor.

Für den Bereich außerhalb des inneren Rohres wurde das Ringspaltprofil der Luft zwischen r_I und r_A durch ein halbes Parabelprofil ersetzt, an das sich die konstante Geschwindigkeit U_A anschließt. Damit lauten die Anfangsbedingungen zwischen dem Rand r_I des inneren Rohres und der Grenze r_B des Berechnungsgebietes:

$z = 0$

$r_I < r \leq r_A$

$$u = u_A\left(1\left(\frac{r_A - r}{r_A - r_I}\right)^2\right) \quad \text{für} \quad r_I < r \leq r_A$$

und

$$u = u_A \quad \text{für } r > r_A \qquad (2.13)$$

$$Y_{H_2} = \tilde{Y}_H = 0 \qquad (2.14)$$

$$Y_{O_2} = \tilde{Y}_O = 0{,}232 \qquad (2.15)$$

$$Y_{N_2} = \tilde{Y}_N = 0{,}768 \qquad (2.16)$$

$$Y_{H_2O} = 0 \qquad (2.17)$$

$$h = 0 \qquad (2.18)$$

Die Werte für Y_{O_2} und Y_{N_2} entsprechen den Massenkonzentrationen in der Luft.

Die Randbedingungen werden auf der Symmetrieachse und der äußeren Berechnungsgrenze r_B benötigt. Die Randwerte selber sind auf der Symmetrieachse allerdings nicht bekannt, stattdessen wird ausgenutzt, daß dort aus Symmetriegründen die Steigung aller Lösungen Null ist.

$z = 0$

$r = 0$ $\qquad\qquad$ $r = r_B$

$$\frac{\partial u}{\partial r} = 0 \qquad\qquad u = u_A \qquad (2.19)$$

$$\frac{\partial Y_{H_2}}{\partial r} = \frac{\partial \tilde{Y}_H}{\partial r} = 0 \qquad\qquad Y_{H_2} = \tilde{Y}_H = 0 \qquad (2.20)$$

$$\frac{\partial Y_{O_2}}{\partial r} = \frac{\partial \tilde{Y}_O}{\partial r} = 0 \qquad\qquad Y_{O_2} = \tilde{Y}_O = 0{,}232 \qquad (2.21)$$

$$\frac{\partial Y_{N_2}}{\partial r} = \frac{\partial \tilde{Y}_N}{\partial r} = 0 \qquad\qquad Y_{N_2} = \tilde{Y}_N = 0{,}768 \qquad (2.22)$$

$$\frac{\partial h}{\partial r} = 0 \qquad\qquad h = h^{o}_{Luft,298} = 0 \qquad (2.23)$$

3. Stoffwerte

Die in diesem Kapitel angegebenen Bestimmungsgleichungen für die Stoffwerte von Gasgemischen sind zum größten Teil der übersichtlichen Zusammenfassung in [18] entnommen. In der Tabelle 3.1 sind für die Komponenten H_2,O_2,N_2 und H_2O die Größen zusammengestellt, die in den Stoffwertgleichungen benötigt werden. Eine umfassendere Zusammenstellung für eine Vielzahl von Gasen findet man in [19]. Wenn man T in K und R in kJ/kmol K verwendet, dann erhält man ρ in m^3/kg, c_{p_i} und c_p in kJ/kg K, μ_i und μ in kg/m s, λ_i und λ in kJ/m s K, D_{ij} und D_{ij} in m^2/s, D_i^T in kg/m s.

Die Dichte wird mit dem idealen Gasgesetz berechnet

$$\rho = \frac{p}{R\,T} \tag{3.0}$$

Für die spezifische Wärmekapazität eines Gasgemisches gilt

$$c_p = \sum_{i=1}^{n_K} Y_i\, c_{p_i} \tag{3.1}$$

Um innerhalb eines weiten Temperaturintervalls eine möglichst genaue Approximation der Wärmekapazität einer Komponente zu erhalten, wird der Ansatz

$$c_{p_i} = A_i + B_i \ln(T) + \frac{C_i}{T} + \frac{D_i}{T^2} \tag{3.2}$$

verwendet.

Die Viskosität und Wärmeleitfähigkeit eines Gemisches werden ausgedrückt durch [15]

$$\mu = \sum_{i=1}^{n_K} \frac{Y_i\, \mu_i}{M_i\, \delta_i} \tag{3.3}$$

$$\lambda = \sum_{i=1}^{n_K} \frac{Y_i\, \lambda_i}{M_i\, \delta_i} \tag{3.4}$$

mit

$$\mu_i = 2{,}6693 \cdot 10^{-6} \frac{(M_i T)^{1/2}}{\sigma_i^2 \, \Omega^{(2,2)}(\hat{T}_i)} \tag{3.5}$$

$$\lambda_i = 3{,}75 \, \mu_i \frac{R}{M_i} E_i \tag{3.6}$$

$$\delta_i = \frac{Y_i}{M_i} + \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{n} K_{ik} \frac{Y_k}{M_k} \tag{3.7}$$

$$G_{ik} = \frac{1}{\sqrt{8}} \left\{1 + \frac{M_i}{M_k}\right\}^{-1/2} \left\{1 + \left(\frac{\mu_i}{\mu_k}\right)^{1/2} \left(\frac{M_k}{M_i}\right)^{1/4}\right\}^2 \tag{3.8}$$

Nach [20] ist der Eucken-Faktor angegeben mit

$$E_i = 0{,}115 + 0{,}354 \frac{M_i \, c_{p_i}}{R} \tag{3.9}$$

Der binäre Diffusionskoeffizient ist gegeben durch [21]

$$D_{ij} = \frac{0{,}0018583 \, T^{3/2} \, (M_i + M_j)^{1/2} \, (M_i \, M_j)^{-1/2}}{p \, \sigma_{ij}^2 \, \Omega^{(1,1)}(\hat{T}_{ij})} \tag{3.10}$$

Das Lennard-Jones Kollisionintegral in Gleichung (3.5) und (3.10) wird durch eine Näherung mit maximal 2,5% Abweichung bestimmt.

$$\ln\Omega^{(i,j)} = A_j + B_j \ln\hat{T} + C_j(\hat{T})^{-1} + D_j(\hat{T})^{-2} \tag{3.11}$$

Die reduzierte Temperatur ist

$$\hat{T}_i = \frac{T}{(\varepsilon/k)_i} \quad \text{und} \quad \hat{T}_{ij} = \frac{T}{(\varepsilon/k)_{ij}} \tag{3.12}$$

mit

$$(\varepsilon/k)_{ij} = \{(\varepsilon/k)_i \, (\varepsilon/k)_j\}^{1/2} \tag{3.13}$$

Der Kollisionsquerschnitt in Gleichung (3.10) ist gegeben durch

$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2} \tag{3.14}$$

Die polynären Diffusionskoeffizienten ergeben sich durch Bilden der Kehrmatrix mit den Koeffizienten

$$A_{ij} = \frac{Y_i}{D_{ij}} + \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{n_K} \frac{M_j}{M_k} \frac{Y_k}{D_{ik}} \qquad i\neq j \tag{3.15}$$

$$A_{ii} = 0$$

Bezeichnet man die Elemente der Kehrmatrix mit A_{ij}^{-1}, dann ergeben sich die polynären Diffusionskoeffizienten zu

$$D_{ij} = A_{ij}^{-1} - \frac{M_i}{M_j} A_{ii}^{-1} \tag{3.16}$$

Der polynäre Thermodiffusionskoeffizient lautet nach [23]

$$D_i^T = \frac{1}{R} \sum_{\substack{k=1 \\ k\neq i}}^{n_K} Y_i Y_k \frac{M_i M_k}{M_i + M_k} \left(\frac{5}{6} C_{ik}^* - 1\right) \left\{\frac{\lambda_k}{M_k \delta_k} - \frac{\lambda_i}{M_i \delta_i}\right\} \tag{3.17}$$

Für C_{ik}^* wird nach [15],[24] ein gemittelter Wert von 0,93 verwendet.

Die Gladstone-Dale Konstanten, deren Einheit m^3/kg ist, haben folgenden Wert:

$$k_{H_2} = 1{,}65 * 10^{-3} \tag{3.18}$$

$$k_{O_2} = 0{,}191 * 10^{-3} \tag{3.19}$$

$$k_{N_2} = 0{,}238 * 10^{-3} \qquad (3.20)$$

$$k_{H_2O} = 0{,}310 * 10^{-3} \qquad (3.21)$$

Die Werte für k_{H_2} und k_{O_2} stammen aus [7] , für k_{N_2} aus [8]. Der Wert für k_{H_2O} wurde aus den Gladstone-Dale Konstanten der atomaren Bestandteilen von H_2O berechnet (vgl.[8],S.27)

Unter der spezifischen Bildungsenthalpie versteht man die auf die Masse bezogene Enthalpie einer chemischen Komponenten. Normalerweise wird die Bildungsenthalpie den Reaktionsprodukten zugeordnet, während die nur aus einer Atomart bestehenden Moleküle wie H_2 und O_2 keine Bildungsenthalpie besitzen. In dieser Arbeit wird jedoch aus Gründen einer sinnfälligeren Darstellung der Wasserstoff zum Träger der Bildungsenthalpie bestimmt, deren Wert aus dem des Reaktionsproduktes H_2O [18] bestimmt wird.

$$h^o_{H_2,298} = - \frac{M_{H_2O}}{M_{H_2}} h^o_{H_2O,298} = 1{,}2 \; 10^5 \qquad (3.22)$$

Die Bildungsenthalpie hat die Einheit kJ/kg und gilt bei der Referenztemperatur T_o=298 K und dem Referenzdruck p_o=1 bar.

	H_2	O_2	N_2	H_2O
M_i (kmol/kg)	2,016	31,998	28,014	18,015
$\tilde{M}_i$ (kmol/kg)	1,008	15,999	14,007	
A_i (kg K/kJ)	-20,37	0,2323	1,598	0,9755
B_i (kg K/kg lnK)	4,695	0,1296	-0,02035	0,2927
C_i (Kg/kJ)	3145	-61,31	-353,7	-848,2
D_i (kg/kJ K)	$-3{,}143\ 10^5$	$1{,}548\ 10^4$	$6{,}825\ 10^4$	$31{,}885\ 10^5$
σ_i (Å)	2,827	3,467	3,798	2,641
$(\varepsilon/k)_i$ (K)	59,7	106,7	71,4	809,1
	A_j	B_j	C_j	D_j
$\ln \Omega^{(1,1)}$	0,021414	-0,122085	0,505088	-0,074757
$\ln \Omega^{(2,2)}$	-0,042775	-0,13594	0,460717	-0,061149

Tabelle 3.1

4. Der Mischungsgrad f

Wie bereits in der Einleitung ausgeführt wurde, liefert das Interferogramm nur eine einzige Information, nämlich den Brechungsindex, der entsprechend dem Gladstone-Dale-Gesetz (1.5)

$$n-1 = \frac{p \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, k_i}{T \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, R_i}$$

eine Funktion der n_K Komponentenkonzentrationen Y_i und der Temperatur T ist. Wenn es nun gelingt, eine Größe f zu finden, die die Konzentrationen und die Temperatur allein bestimmt, also $Y_i = f(f)$ und $T = f(f)$, dann ist auch der Brechungsindex nur eine Funktion von f, also $n-1 = f(f)$

Damit ließe sich die Aufgabe, die Konzentrations- und Temperaturverläufe aus einem Interferogramm zu bestimmen, folgendermaßen lösen: Aus dem Interferogramm wird der Brechungsindexverlauf ermittelt, mit dem aus dem inversen Zusammenhang $f = f(n-1)$ die Größe f und damit die Konzentrationen Y_i und die Temperatur T bestimmt werden können. Die Größe f, die im Schrifttum auch als "conserved property"(vgl. [25]) bezeichnet wird, soll hier als "Mischungsgrad" bezeichnet werden.

Für die Herleitung des Mischungsgrades sind zwei Postulate notwendig, die es gestatten, die n_E Elementenerhaltungsgleichungen (2.5) und die Enthalpiegleichung(2.3) in eine mathematisch ähnliche Form zu bringen.

1.Postulat: Die Diffusionskoeffizienten aller chemischen Komponenten sind lokal gleich, d.h. Verzicht auf polynäre Diffusion und Thermodiffusion. Der gemeinsame Diffusionskoeffizient darf allerdings infolge von Temperaturänderung von Ort zu Ort veränderlich sein. Anstelle von Gleichung (2.6) kann für den Diffusionsstromvektor der einfache Ansatz der Fick'schen Diffusion verwendet werden

$$j_i = - \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial r} \qquad (4.1)$$

Im Folgenden soll die rechte Seite der Elementenerhaltungsgleichung (2.5) betrachtet werden, in die Gleichung (4.1) eingeführt wird:

$$\frac{\partial}{\partial r}\Big(r \sum_{i=1}^{n_K} \frac{a_{ik}\,\tilde{M}_k}{M_i}\,\rho D\,\frac{\partial Y_i}{\partial r}\Big)$$

$$= \frac{\partial}{\partial r}\Big(r\rho D\,\frac{\partial}{\partial r}\sum_{i=1}^{n_K}\frac{a_{ik}\,\tilde{M}_k}{M_i}\,Y_i\Big) \qquad (4.2)$$

Nun ist aber die Konzentration der k-ten Atomsorte gleich der Summe ihrer Anteile an den Konzentrationen aller im System vorkommenden n_K Komponenten

$$\tilde{Y}_k = \sum_{i=1}^{n_K} \frac{a_{ik}\,\tilde{M}_k}{M_i}\,Y_i \qquad (4.3)$$

Unter Beachtung von Gleichung (4.2) und (4.3) erhält man als neue Elementenerhaltungsgleichungen

$$\rho r\Big(u\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial z} + v\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial r}\Big) = \frac{\partial}{\partial r}\Big(r\rho D\,\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial r}\Big) \qquad (4.4)$$

$$k = 1, n_E$$

2. Postulat: Der Transport von Partialmasse und Energie geschieht gleich schnell, d.h. die Lewis-Zahl hat den Wert Eins.

$$Le = \frac{\rho D c_p}{\lambda} = 1 \qquad (4.5a)$$

bzw.

$$\rho D = \frac{\lambda}{c_p} \qquad (4.5b)$$

Damit kann man die Enthalpiegleichung wie folgt vereinfachen: In den Enthalpiestromvektor j_q (Gleichung (2.4)) wird der einfache Ausdruck für den Diffusionsstrom j_i (Gleichung 4.1) eingeführt

$$j_q = - \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial r} + \sum_{i=1}^{n_K} h_i (- \rho D \frac{\partial Y_i}{\partial r} + \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial Y_i}{\partial r})$$

$$= - \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial h}{\partial r} + \sum_{i=1}^{n_K} h_i (\frac{\lambda}{c_p} - \rho D) \frac{\partial Y_i}{\partial r} \qquad (4.6)$$

Der Klammerausdruck in Gleichung (4.6) verschwindet unter Berücksichtigung von Gleichung (4.5b). Wenn noch $- \frac{\lambda}{c_p}$ durch $- \rho D$ ersetzt wird, dann erhält man als neuen Enthalpiestromvektor

$$j_q = - \rho D \frac{\partial h}{\partial r} \qquad (4.7)$$

und als neue Enthalpiegleichung

$$\rho r (u \frac{\partial h}{\partial z} + v \frac{\partial h}{\partial r}) = \frac{\partial}{\partial r} (r \rho D \frac{\partial h}{\partial r}) \qquad (4.8)$$

Die n_E Elementenerhaltungsgleichungen (4.4) und die Enthalpiegleichung (4.8) sind bis auf die unterschiedlichen Unbekannten $\tilde{Y}_k$ und h formal gleich. Es handelt sich um quasi-lineare Differentialgleichungen ohne Quelltern, deren Lösungsverlauf allein durch die Vorgabe der Randwerte bestimmt wird. Wenn

es gelingt, anstelle der $\tilde{Y}_k$ bzw. h eine neue Unbekannte f so zu definieren, daß diese für alle verschiedenen physikalischen Werte der $\tilde{Y}_k$ bzw. h eines Randes formal nur einen einzigen Randwert liefert, dann reduzieren sich die n_E Elementenerhaltungsgleichungen und die Enthalpiegleichung auf eine einzige Gleichung mit der Unbekannten f

$$\rho r(u\frac{\partial f}{\partial z} + v\frac{\partial f}{\partial r}) = \frac{\partial}{\partial r}(r\rho D\frac{\partial f}{\partial r}) \qquad (4.9)$$

Die Definition der gemeinsamen Unbekannten f lautet für die Elementenkonzentrationen

$$f = \frac{\tilde{Y}_k - \tilde{Y}_{k\infty}}{\tilde{Y}_{ko} - \tilde{Y}_{k\infty}} \qquad (4.10)$$

und für die Enthalpie

$$f = \frac{h - h_\infty}{h_o - h_\infty} \qquad (4.11)$$

Die Definition einer solchen Funktion ist ursprünglich für eine ideale Mischkammer (vgl. [25], S.113) abgeleitet worden, in der zwei aus räumlich getrennten Zuläufen eingespeiste Massenströme gemischt werden. Die Zustände in dem ersten Zulauf werden mit dem Index o, d.h. $\tilde{Y}_{ko}$ und h_o, versehen, die im zweiten Zulauf mit ∞, also $\tilde{Y}_{k\infty}$ und h_∞. Setzt man nun $\tilde{Y}_{ko}$ bzw. h_o in Gleichung (4.10) bzw. (4.11) ein, dann ergibt sich in allen Fällen f = 1, und für $\tilde{Y}_{k\infty}$ bzw. h_∞ immer f = o. Damit hat man Randwerte erhalten, die invariant gegenüber den physikalischen Randwerten sind. Im Fall einer Diffusionsflamme herrscht der Zustand o am Ort der Brennstoffzuführung (Brennerrohr) und der Zustand ∞ in der Umgebung. Für das H_2-Luft

System resultiert der Zustand o aus den Anfangsbedingungen (2.8) - (2.10) und (2.12), der Zustand ∞ aus den äußeren Randbedingungen (2.20)-(2.23).

Löst man Gleichung (4.10a,b) nach $\tilde{Y}$ bzw. h auf

$$\tilde{Y}_k = f(\tilde{Y}_{ko} - \tilde{Y}_{k\infty}) + \tilde{Y}_{k\infty} \qquad (4.12)$$

$$h = f(h_o - h_\infty) + h_\infty \qquad (4.13)$$

und setzt die entsprechenden Randwerte ein, dann erhält man

$$\tilde{Y}_H = f \qquad (4.14)$$

$$\tilde{Y}_O = (1 - f)\tilde{Y}_{O\infty} \qquad (4.15)$$

$$\tilde{Y}_N = (1 - f)\tilde{Y}_{N\infty} \qquad (4.16)$$

$$h = f\, h_o = f\, h^o_{H_2,298} \qquad (4.17)$$

Im $\tilde{Y}$,f - Diagramm stellen sich die Elementenkonzentrationen als Geraden dar (Bild 4.1).

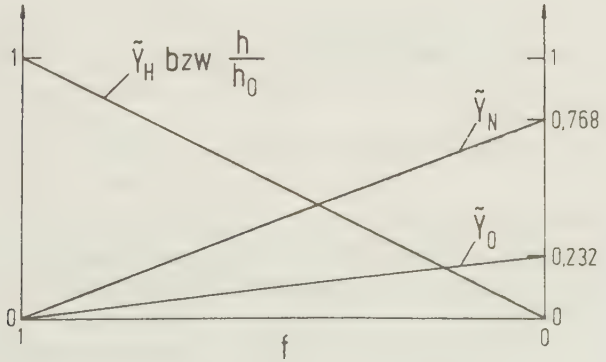


Bild 4.1 Verlauf der Elementenkonzentrationen als Funktion des Mischungsgrades

Die Gerade für $\tilde{Y}_H$ gibt auch den Verlauf von $\frac{h}{h_o}$ wieder.

Wie am Anfang schon erwähnt wurde, soll der örtliche Verlauf von f aus dem Interferogramm mit Hilfe der aus dem Gladstone-Dale-Gesetz abgeleiteten Beziehung $f = f(n-1)$ ermittelt werden. Dazu müssen aber die Zusammenhänge $Y_i = f(f)$ und $T = f(f)$ bekannt sein, während die oben durchgeführte Herleitung nur $\tilde{Y}_k = f(f)$ und $h = f(f)$ geliefert hat (Gleichung (4.12)). Ebenso wie bei den numerischen Berechnungen (vgl. Kapitel 2.) fehlen also noch Beziehungen, mit denen man die Y_i aus den $\tilde{Y}_k$ und T aus h berechnen kann. Diese Beziehungen werden im folgenden Kapitel hergeleitet.

5. Bestimmung der Konzentrationen und der Temperatur aus dem Brechungsindex

In diesem Kapitel werden Beziehungen hergeleitet, mit denen aus einer vorliegenden Brechungsindexverteilung die Konzentrations- und Temperaturverläufe in einem Mehrkomponenten-Freistrahl bzw. in einer Diffusionsflamme bestimmt werden können. Dies geschieht für ein Wasserstoff-Luft-System. Systeme mit anderen chemischen Komponenten können analog behandelt werden, wenn die hier gemachten Postulate übernommen werden.

Eine Aussage über die Strömungsgeschwindigkeiten können aus der Brechungsindexverteilung nicht gewonnen werden, da der für die Herleitung verwendete Mischungsgrad f für die Enthalpie- und Elementenerhaltungsgleichungen gilt, nicht jedoch für die Kontinuitäts- und Impulsgleichung.

Auf die Bestimmung des Brechungsindex aus einem Interferogramm wird in diesem Kapitel nicht eingegangen. Das hierzu notwendige Verfahren hängt von der Art des verwendeten Interferometers ab und wird für das in dieser Arbeit eingesetzte Mach-Zehnder-Interferometer Kapitel 7.2 beschrieben.

5.1 Konzentration im isothermen Mehrkomponenten-Freistrahl

Die Herleitung erfolgt auf zwei verschiedenen Wegen: Einmal unter Verwendung des Mischungsgrades f und zum anderen durch Betrachtung eines Zweistoff-Modells.

5.1.1 Herleitung unter Verwendung des Mischungsgrades f

Im Mehrkomponenten-Freistrahl ohne Reaktion gilt über die Erhaltung der Elemente hinaus auch die Erhaltung der chemischen Komponenten. Deshalb ist es angebracht, anstelle der n_E Elementenerhaltungsgleichungen (2.5) n_K Komponentenerhaltungsgleichungen zu verwenden (vgl. [25]).

$$\rho r\left(u\frac{\partial Y_i}{\partial z} + v\frac{\partial Y_i}{\partial r}\right) = -\frac{\partial}{\partial r}(r j_i) \qquad (5.1)$$

$$i=1,n_K$$

mit dem Diffusionsstromvektor j_i

$$j_i = \rho \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n_K} \frac{M_i}{\bar{M}^2} D_{ij} (\bar{M} Y_j) \qquad (5.2)$$

Wegen der Annahme eines isothermen Freistrahls enthält der Diffusionsstromvektor im Gegensatz zu Gleichung (2.6) keine Thermodiffusion.

Die Unbekannten der n_K Gleichungen (5.1) sind die Konzentrationen Y_i der Komponenten. Analog zum Vorgehen in Kapitel 4. soll jetzt der Mischungsgrad f für die Komponentenkonzentrationen hergeleitet werden. Macht man wieder das Postulat gleicher Diffusionskoeffizienten für alle Komponenten und verwendet anstelle von Gleichung (5.2) den binären Diffusionsstrom (Gleichung (4.1)), dann nehmen die Komponentenerhaltungsgleichungen (5.1) die folgende Form an

$$\rho r\left(u\frac{\partial Y_i}{\partial z} + v\frac{\partial Y_i}{\partial r}\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(r\rho D \frac{\partial Y_i}{\partial r}\right) \qquad (5.3)$$

Die n_K Komponentenerhaltungsgleichungen (5.3) lassen sich durch Einführen einer neuen Unbekannten f

$$f = \frac{Y_i - Y_{i\infty}}{Y_{i_O} - Y_{i\infty}} \qquad (5.4)$$

die für alle n_K Konzentrationen an den Stellen o und ∞ die Randwerte 1 und 0 annimmt, auf eine einzige Gleichung reduzieren.

$$\rho r\left(u\frac{\partial f}{\partial z} + v\frac{\partial f}{\partial r}\right) = \frac{\partial}{\partial r}\left(r\rho D \frac{\partial f}{\partial r}\right) \qquad (5.5)$$

Die Definition von f (5.4) hat die gleiche Form wie Gleichung (4.1o) nur werden anstelle der Elementenkonzentration Y_K die Komponentenkonzentrationen Y_i verwendet.

Die neue Unbekannte f soll nun aber nicht durch Lösen von

Gleichung (5.5) bestimmt werden, sondern mit Hilfe des Brechungsindex. Dazu löst man Gleichung (5.4) nach Y_i auf

$$Y_i = f\,(Y_{io} - Y_{i\infty}) + Y_{i\infty} \tag{5.6}$$

und ersetzt im Gladstone-Dale-Gesetz in der Formulierung (1.5)

$$n-1 = \frac{p \sum_{i=1}^{n_K} Y_i\, k_i}{T \sum_{i=1}^{n_K} Y_i\, R_i}$$

die Konzentrationen Y_i durch Gleichung (5.6)

$$n-1 = \frac{p \left[f \sum_{i=1}^{n_K} (Y_{io} - Y_{i\infty})k_i + \sum_{i=1}^{n_K} Y_{i\infty}k_i\right]}{T \left[f \sum_{i=1}^{n_K} (Y_{io} - Y_{i\infty})R_i + \sum_{i=1}^{n_K} Y_{i\infty}R_i\right]} \tag{5.7}$$

Löst man Gleichung (5.7) nach f auf

$$f = \frac{p \sum_{i=1}^{n_K} Y_{i\infty}k_i - T(n-1) \sum_{i=1}^{n_K} Y_{i\infty}R_i}{T(n-1) \sum_{i=1}^{n_K} (Y_{io} - Y_{i\infty})R_i - p \sum_{i=1}^{n_K} (Y_{io} - Y_{i\infty})k_i} \tag{5.8}$$

dann erhält man eine Beziehung, mit der man für einen beliebigen Punkt im Freistrahl f als Funktion des lokalen Wertes (n-1) und den bekannten Randwerten Y_{io} und $Y_{i\infty}$ bzw. den Stoffgößen k_i und R_i bestimmen kann. Die Konzentrationen Y_i erhält man, indem das mit Hilfe von Gleichung (5.8) ermittelte f in Gleichung (5.6) eingesetzt wird.

Für den Fall des H_2-Luft Freistrahls mit den Komponenten H_2, O_2,N_2 gelten entsprechend der in Abschnitt 2.1 angegebenen Anfangs- und Randbedingungen im Zustand o und ∞

$$Y_{H_2,o} = 1 \qquad Y_{H_2,\infty} = 0$$

$$Y_{O_2,o} = 0 \qquad Y_{O_2,\infty} = 0{,}232$$

$$Y_{N_2,o} = 0 \qquad Y_{N_2,\infty} = 0.768 \tag{5.9}$$

Damit ergibt sich aus Gleichung (5.6)

$$Y_{H_2} = f \qquad (5.1o)$$

$$Y_{O_2} = (1-f)\, Y_{O_2,\infty} \qquad (5.11)$$

$$Y_{N_2} = (1-f)\, Y_{N_2,\infty} \qquad (5.12)$$

Im Y,f Diagramm sind diese Kontentrationsverläufe identisch mit den Geraden, die in Bild (4.1) schon für die entsprechenden Elementenkonzentrationen gezeigt wurden. Für die Austrittsebene des H_2 Freistrahls in Luft läßt sich der örtliche Verlauf von f einfach ermitteln. Wegen $Y_{H_2} = f$ hat der Mischungsgrad dort den Verlauf der Wasserstoffkonzentration. Zwischen der Symmetrieachse und dem Rand r_I der Düse, aus der nur H_2 austritt, hat f den Wert Eins, außerhalb des Düsenrandes, wo nur Luft vorkommt, den Wert Null (Bild 5.1).

In Bild 5.2 sind einige Brechungsindizes und die entsprechenden Komponentenkonzentrationen zusammengestellt. Die Brechungsindizes liegen zwischen dem Wert für H_2 $(n-1 = 1{,}36\cdot 1o^{-4})$ und dem für Luft $(n-1 = 2{,}68\cdot 1o^{-4})$. Die Werte für Y_{H_2} gelten gemäß Gleichung (5.1o) ebenfalls für f. Bild 5.2 enthält ebenso wie die für die Berechnung verwendeten Gleichungen (5.8) und (5.1o) - (5.12) keine Angaben über die Geometrie. Es ist deshalb für alle H_2-Luft Gasgemische, unabhängig von Geometrie und Strömungszuständen, gültig.

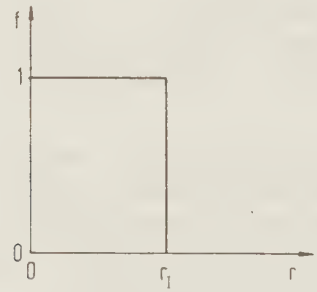


Bild 5.1 Radialer Verlauf von f in der Austrittsebene des Freistrahls.

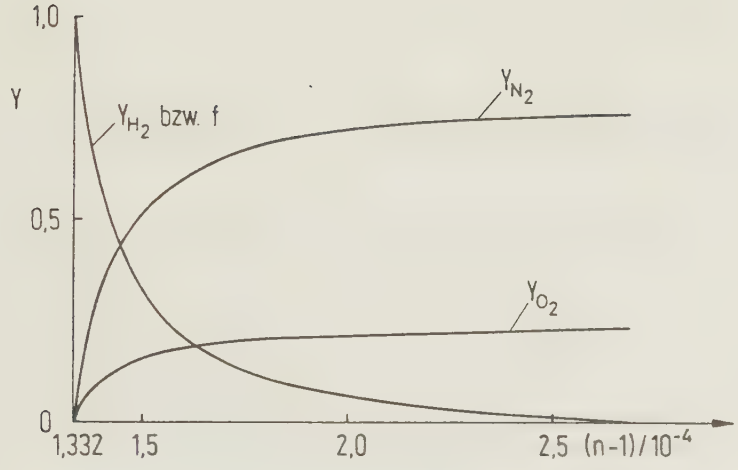


Bild 5.2 Komponentenkonzentrationen im isothermen H_2-Luft Freistrahl in Abhängigkeit vom Brechungsindex.

5.1.2 Herleitung unter Betrachtung eines Zweistoff-Modells

Die im letzten Abschnitt abgeleitete Beziehung f = f (n-1) kann auch ohne die formale Herleitung des Mischungsgrades entwickelt werden.

Für die Berechnung der Konzentration eines isobaren und isothermen Gasgemisches stehen nur zwei Gleichungen (1.5) und (1.6) zur Verfügung

$$\sum_{i=1}^{n_K} Y_i = 1$$

$$n-1 = \frac{p \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, k_i}{T \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, R_i}$$

Diese beiden Gleichungen reichen aus, wenn man die Zahl der Komponenten im Gasgemisch auf zwei beschränkt. Deshalb soll ein Zweistoff-Modell betrachtet werden, bei dem eine Komponente Q aus einer Quelle austritt, während die zweite Komponente U die Umgebung ausfüllt. Beide Komponenten können Gasgemische sein, die jeweils aus einer beliebigen Anzahl von Unterkomponenten bestehen. Führt man die Konzentration Y_Q und Y_U der beiden Komponenten in Gleichung (1.5) und (1.6) ein und kombiniert beide Gleichungen, dann erhält man

$$n-1 = \frac{p \, (\, Y_Q k_Q + (1-Y_Q) k_U)}{T \, (\, Y_Q R_Q + (1-Y_Q) R_U)} \qquad (5.13)$$

bzw. nach Y_Q aufgelöst

$$Y_Q = \frac{pk_U - T(n-1)R_U}{T(n-1) \, (R_Q - R_U) - p(k_Q - k_U)} \qquad (5.14)$$

Die Stoffgrößen k_Q und R_Q bzw. k_U und R_U müssen natürlich konstant bleiben. Das ist aber nur gewährleistet, wenn sich die Zusammensetzung von Q und U aus ihren jeweiligen Unterkomponenten nicht ändert, d.h. es darf keinen Entmischung der Unterkomponenten eintreten. Dies ist aber gleichbedeutend mit der Aussage,

daß die Diffusionskoeffizienten aller Unterkomponenten (z.B. Unterkomponenten von Luft: O_2 und N_2) einer Komponenten gleich sind. Deshalb ist die Zusammensetzung der Komponente Q immer dieselbe wie am Ort ihres Austritts (Index o) und die der Komponente U immer dieselbe wie im Unendlichen (Index ∞). Die Konzentration der i-ten Unterkomponenten $[Y_i]_Q$ der Komponente Q wird durch

$$[Y_i]_Q = Y_Q \cdot Y_{i_o} \qquad (5.15)$$

bestimmt, und $[Y_i]_U$ der Komponente U durch

$$[Y_i]_U = Y_U \cdot Y_{i\infty} \qquad (5.16)$$

Gleichung (5.16) läßt sich mit Gleichung (1.6) umformen zu

$$[Y_i]_U = (1-Y_Q) \cdot Y_{i\infty} \qquad (5.17)$$

Die Gesamtkonzentration der i-ten Unterkomponente setzt sich zusammen aus ihren Anteilen in den Komponenten Q und U

$$Y_i = [Y_i]_Q + [Y_i]_U = Y_Q (Y_{i_o} - Y_{i\infty}) + Y_{i\infty} \qquad (5.18)$$

Vergleicht man den rechten Teil von Gleichung (5.18) mit (5.6), dann ergibt sich

$$Y_Q = f \qquad (5.19)$$

Ebenso gilt die Identität von Gleichung (5.14) und (5.8).

Die hier verwendete physikalische Betrachtungsweise läßt deutlich die Grenzen des im letzten Abschnitt hergeleiteten Verfahrens für ein Mehrkomponenten-Gemisch erkennen. Der formal hergeleitete Mischungsgrad f geht also ebenfalls von einem Zweistoffsystem aus, wobei jeder "Stoff" ein Gemisch aus Unterkomponenten mit gleichen Diffusionseigenschaften sein kann. Diese Bedingung ist erfüllt, wenn die Molekulargewichte der Unterkomponenten eines "Stoffes" nicht zu sehr voneinander abweichen. Für das System H_2-Luft ist dies annähernd gegeben, da die Molekulargewichte der Unterkomponenten O_2 und N_2 des "Stoffes" Luft nahe beieinanderliegen und der zweite "Stoff" sowieso nur aus der einzigen Komponente H_2 besteht.

5.2 Konzentrationen und Temperatur in der H_2-Luft Diffusionsflamme

Bevor im Abschnitt 5.2.2 die Gleichungen entwickelt werden, mit denen sich die Konzentrationen und Temperatur aus dem Brechungsindex bestimmen lassen, müssen erst noch mit Hilfe des Flammenflächenmodells Beziehungen hergeleitet werden, die es gestatten, die Komponentenkonzentrationen Y_i aus den Elementenkonzentrationen $\tilde{Y}_k$ zu berechnen.

5.2.1 Das Flammenflächenmodell

Das Flammenflächenmodell [26], [27] wird von der Vorstellung bestimmt, daß die gesamte Reaktion auf einer unendlich dünnen Fläche stattfindet, auf die Sauerstoff und Brennstoff von entgegengesetzten Seiten hindiffundieren und dort verschwinden (Bild 5.3). Die Konzentrationen der Reaktionskomponenten weisen hingegen ebenso wie die Temperatur ein singuläres Maximum auf. Es läuft nur eine einzige Bruttoreaktion ohne Zwischenprodukte mit unendlich großer Reaktionsgeschwindigkeit ab. Auch finden keine Rückwärtsreaktionen und Dissoziation statt, was bedeutet, daß das chemische Gleichgewicht gänzlich auf die Seite der Produkte verschoben ist.

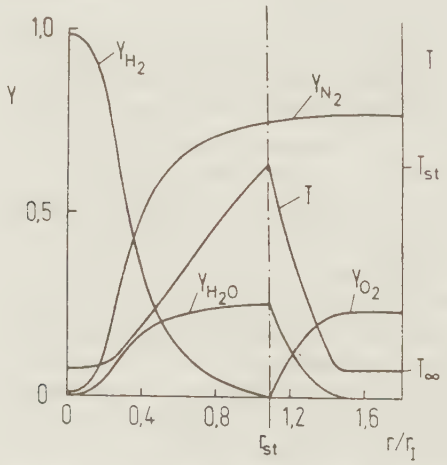


Bild 5.3 Komponentenkonzentrationen und Temperatur im Flammenflächenmodell

Die zu den Komponentenkonzentrationen Y_i gehörenden Elementenkonzentrationen $\tilde{Y}_k$ lassen sich einfach bestimmen. Die Elementenkonzentration des k-ten Atoms setzt sich zusammen aus der Summe seiner jeweiligen Konzentrationsanteile an den einzelnen Molekülen eines Gasgemisches.

$$\tilde{Y}_k = \sum_{i=1}^{n_K} \frac{a_{ik}\,\tilde{M}_k}{M_i}\, Y_i \qquad (5.2o)$$

In Bild 5.4 sind die Elementenkonzentrationen dargestellt, die den Komponentenkonzentrationen in Bild 5.3 entsprechen.

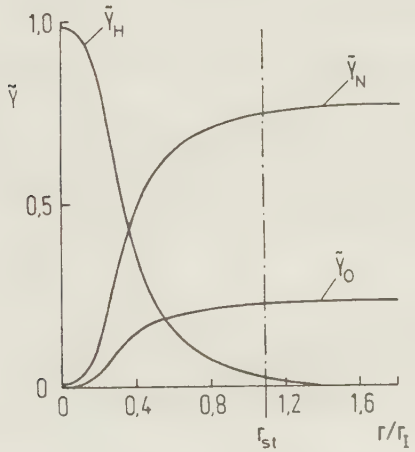


Bild 5.4 Elementenkonzentrationen im Flammenflächenmodell

Mit den Elementenkonzentrationen von Sauerstoff und Brennstoff ist es nun möglich, den Ort der Reaktion zu bestimmen. Das Flammenflächenmodell wird durch die Beziehung "stöchiometrisch gemischt = verbrannt" beschrieben. Das bedeutet, daß die Reaktion

dort stattfindet, wo die Elementenmassen der Reaktanden in dem Verhältnis auftreten, wie es ihrem Vorkommen in den Reaktionsprodukten entspricht. Für die Knallgasreaktion

$$H_2 + \frac{1}{2} O_2 \rightarrow H_2O \qquad (5.21)$$

ist das stöchiometrische Massenverhältnis $[\frac{\tilde{m}_O}{\tilde{m}_H}]_{st}$ der im einzigen Reaktionsprodukt H_2O vorkommenden Atome gegeben durch

$$[\frac{\tilde{m}_O}{\tilde{m}_H}]_{st} = [\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H}]_{st} = \frac{1/2\ M_{O_2}}{M_{H_2}} = 7{,}937 \qquad (5.22)$$

Die Flammenfläche ist in der H_2-Luft Diffusionsflamme überall dort anzusiedeln, wo das Verhältnis der Elementenkonzentrationen von Sauerstoff zu Wasserstoff gleich dem stöchiometrischen Verhältnis ist.

$$\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H} = [\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H}]_{st} = 7{,}937 \qquad (5.23)$$

Die Konzentration des Reaktionsproduktes H_2O ist am Ort der Flammenfläche gleich der Summe der Konzentrationen der Elemente, aus denen es entstanden ist.

$$Y_{H_2O} = \tilde{Y}_O + \tilde{Y}_H \qquad (5.24)$$

während, wie anfangs schon erwähnt, die Konzentrationen der reagierenden Komponenten Null sind.

$$Y_{H_2} = 0 \qquad (5.25)$$

$$Y_{O_2} = 0 \qquad (5.26)$$

und die Komponentenkonzentration des Stickstoffs, der als Inertgas an keiner Reaktion teilnimmt, wie überall in der Flamme, gleich seiner Elementenkonzentration ist

$$Y_{N_2} = \tilde{Y}_N \qquad (5.27)$$

Die Gleichungen (5.24) - (5.26) gelten nur in der Flammenfläche. Um die Komponentenkonzentrationen auch in Gebieten bestimmen zu können, die nicht zur Flammenfläche gehören, wird die Flamme in zwei Zonen aufgeteilt (Bild 5.5)

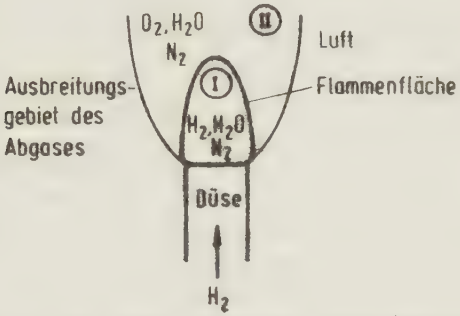


Bild 5.5 Komponentenzonen in der H_2-Luft Diffusionsflamme

In der Zone I, die von der Flammenfläche eingehüllt wird, kommt kein molekularer Sauerstoff vor, während in der Zone II kein molekularer Brennstoff (Wasserstoff) anzutreffen ist.

Zunächst sollen die Komponentenkonzentrationen in der Zone I bestimmt werden. Da hier

$$Y_{O_2} = 0 \qquad (5.28)$$

gilt, muß sämtlicher Sauerstoff in diesem Gebiet in Reaktionsprodukten gebunden sein. Deshalb kann die Konzentration des Produktes H_2O mit der Elementenkonzentration $\tilde{Y}_O$ ausgedrückt werden.

$$Y_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}}{m_{O,H_2O}} \cdot \tilde{Y}_O = \frac{M_{H_2O}}{\frac{1}{2}M_{O_2}} \cdot \tilde{Y}_O = 1{,}126 \cdot \tilde{Y}_O \qquad (5.29)$$

$\frac{m_{H_2O}}{m_{O,H_2O}}$ ist das Massenverhältnis von Wasser zu dem im Wasser gebundenden Sauerstoff.

Der molekulare Wasserstoff ist gleich der Differenz der vorhandenen Wasserstoff-Atome und der im Wasser gebundenen. Daraus folgt für Y_{H_2}

$$Y_{H_2} = \tilde{Y}_H - \tilde{Y}_{H,H_2O} \tag{5.30}$$

Das noch unbekannte Y_{H,H_2O} erhält man mit

$$Y_{H,H_2O} = \frac{\tilde{m}_{H,H_2O}}{m_{H_2O}} \cdot Y_{H_2O} = \frac{M_{H_2}}{M_{H_2O}} \cdot Y_{H_2O} \tag{5.31}$$

wobei $\frac{\tilde{m}_{H,H_2O}}{m_{H_2O}}$ das Massenverhältnis des im Wasser gebundenen Wasserstoffs zum Wasser ist. Aus den Gleichungen (5.29) - (5.31) folgt schließlich

$$Y_{H_2} = \tilde{Y}_H - \frac{M_{H_2}}{M_{H_2O}} \cdot \frac{M_{H_2O}}{\frac{1}{2}M_{O_2}} \cdot \tilde{Y}_O = \tilde{Y}_H - 0{,}126\ \tilde{Y}_O \tag{5.32}$$

Für die Komponentenkonzentration des Stickstoffs Y_{N_2} gilt

$$Y_{N_2} = \tilde{Y}_N \tag{5.33}$$

In der Zone II hingegen kann Wasserstoff nur im Wasser gebunden sein, weil hier gilt

$$Y_{H_2} = 0 \tag{5.34}$$

Aus der Elementenkonzentration des Wasserstoffs $\tilde{Y}_H$ kann deshalb die Konzentration des Wassers Y_{H_2O} berechnet werden.

$$Y_{H_2O} = \frac{m_{H_2O}}{\tilde{m}_{H,H_2O}} \cdot \tilde{Y}_H = \frac{M_{H_2O}}{M_{H_2}} \cdot \tilde{Y}_H = 8{,}937 \cdot \tilde{Y}_H \tag{5.35}$$

Der molekulare Sauerstoff ergibt sich als Differenz der vorhandenen Sauerstoff-Atome und des im Wasser gebundenen Sauerstoffs. Damit läßt sich Y_{O_2} bestimmen.

$$Y_{O_2} = \tilde{Y}_O - \tilde{Y}_{O,H_2O}$$

$$= \tilde{Y}_O - \frac{\tilde{m}_{O,H_2O}}{\tilde{m}_{H_2O}} Y_{H_2O}$$

$$= \tilde{Y}_O - \frac{1/2\ M_{O_2}}{M_{H_2O}} \frac{M_{H_2O}}{M_{H_2}} Y_{H_2O}$$

$$= \tilde{Y}_O - 7{,}937\ Y_{H_2O} \qquad (5.36)$$

Für den Stickstoff gilt wieder

$$Y_{N_2} = \tilde{Y}_N \qquad (5.37)$$

Damit sind alle Komponentenkonzentrationen Y_i der Flamme als Funktion der Elementenkonzentrationen $\tilde{Y}_k$ bestimmt.

5.2.2 Die implizite Beziehung n-1=f(f)

Ursprünglich bestand die Absicht, an dieser Stelle die Beziehung f=f(n-1) anzugeben, wie dies auch im Fall des Mehrkomponenten-Freistrahls (Abschnitt 5.1.1.) gesehen ist. Für einen interferometrisch gemessenen (n-1)-Wert hätte man mit dieser Beziehung erst den entsprechenden Funktionswert für f und anschließend mit Hilfe der in Kapitel 4. und Abschnitt 5.2.1 hergeleiteten Beziehungen die Konzentrationen Y_i und Temperatur T in der Flamme berechnen können. Stattdessen wird in diesem Abschnitt die implizite Funktion n-1=f(f) angegeben mit f als unabhängige Variable. Diese Beziehung wird benutzt, um den funktionalen Zusammenhang zwischen f und (n-1) bzw (n-1) und Y_i, T für das Intervall $0 \leq f \leq 1$ zu bestimmen.

Der Grund für dieses implizite Vorgehen ist, daß die ursprünglich angestrebte explizite Funktion f=f(n-1) sich zwar problemlos herleiten, jedoch nur unter Schwierigkeiten lösen läßt. Ihre Lösung hat die Form einer quadratischen Gleichung $f = a \pm \sqrt{b}$ mit $a = f(n-1, \bar{c}_p)$ und $b = f(n-1, \bar{c}_p)$. Die Größe $\bar{c}_p$ ist ihrerseits wieder eine Funktion von f, so daß die Lösung einem Iterationsprozeß unterworfen werden muß. Die dabei auftretenden Schwierigkeiten sind: divergentes Lösungsverhalten, negative Wurzeln für schlechte Schätzwerte von $\bar{c}_p$ und wechselnde Gültigkeit des Wurzelvorzeichens für die physikalisch sinnvolle Lösung.

Im Folgenden wird nun stattdessen die implizite Funktion n-1=f(f) hergeleitet.

Wie schon in Kapitel 4. dargestellt wurde, kann f Werte zwischen 1 und 0 annehmen, wobei der Wert f = 1 dem Austrittsort des Brennstoffstrahls entspricht, und f = 0 sich in der ungestörten Umgebung einstellt.

$r = 0 \;,\; z = o \qquad\qquad f = 1 \qquad\qquad (5.38)$

$r = \infty \qquad\qquad f = 0 \qquad\qquad (5.39)$

Außer diesen beiden ausgewiesenen Werten nimmt f an der Stelle stöchiometrischer Mischung einen für jedes reaktive System charakteristischen Wert f_{st} an, der sich aus dem stöchiometrischen Massenverhältnis von Brennstoff zu Sauerstoff berechnen läßt. Für das H_2-Luft System läßt sich mit Gleichung (4.14)-(4.15) schreiben

$$\left[\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H}\right]_{st} = \frac{(1 - f_{st})\tilde{Y}_{O\infty}}{f_{st}} \qquad (5.40)$$

Mit $\left[\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H}\right]_{st} = 7{,}937$ und $\tilde{Y}_O = 0{,}232$ folgt

$$f_{st} = \frac{\tilde{Y}_{O\infty}}{\left[\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H}\right]_{st} + Y_{O\infty}} = 0{,}02818 \qquad (5.41)$$

f_{st} gilt in der Flammenfläche, und der zugehörige Radius r_{st} markiert den Ort der Reaktion.

$$r = r_{st} \qquad\qquad f = f_{st} = 0{,}02818 \qquad (5.42)$$

Wird der Randwert (5.42) nun zwischen (5.38) und (5.39) eingefügt, dann lassen sich wieder zwei Bereiche unterscheiden: Im 1. Bereich liegt f im Intervall $1 \leq f \leq f_{st}$, was für den Radius $o \leq r \leq r_{st}$ bedeutet. Dieser Bereich entspricht der Zone I in Bild 5.5. Im 2. Bereich gilt für f das Intervall $f_{st} \leq f \leq O$ bzw. für den Radius $r_{st} \leq r \leq \infty$. Dieser Bereich deckt sich mit Zone II.

Bei der Ableitung des Zusammenhangs n-1=f(f) wird wieder vom Gladstone-Dale Gesetz in der Form (1.5) ausgegangen:

$$n-1 = \frac{p \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, k_i}{T \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \, R_i}$$

Die Gleichungen, mit denen sich die Y_i aus den $\tilde{Y}_k$ berechnen lassen, sind, wie im Abschnitt Flammenflächenodell gezeigt, für jede Zone verschieden. Deshalb gibt es auch für jede Zone einen eigenen Zusammenhang n-1=f(f). Kriterium für die Auswahl der zuständigen Funktion ist, ob $f \geq f_{st}$ oder $f \leq f_{st}$ gilt. Für den Randwert f_{st} können die Funktionen beider Zonen verwendet werden.

Zuerst soll die Funktion für die Zone I bzw. $f \geq f_{st}$ entwickelt werden. Dazu werden in die Gleichungen für die Komponentenkonzentrationen (5.29), (5.32) und (5.33) die Ausdrücke für die Elementenkonzentrationen (4.14) - (4.16) eingeführt.

$$Y_{H_2O} = 1{,}126 \; (1 - f) \tilde{Y}_{O\infty} \qquad (5.43)$$

$$Y_{H_2} = f(1 + 0{,}126 \; \tilde{Y}_{O\infty}) - 0{,}126 \; \tilde{Y}_{O\infty} \qquad (5.44)$$

$$Y_{N_2} = (1 - f) \tilde{Y}_{N\infty} \qquad (5.45)$$

$$Y_{O_2} = O \qquad (5.46)$$

Die letzte Gleichung wurde der Vollständigkeit halber hinzugefügt. Damit sind die im Gladstone-Dale-Gesetz benötigten Y_i als Funktion von f bestimmt. Da der Druck p als konstant angenommen wird, muß nur noch die Temperatur T durch f ausgedrückt werden. Dies geschieht mit der Beziehung (4.17)

$$h = f\, h^{o}_{H_2,298}$$

Für die spezifische Enthalpie eines Gasgemisches gilt

$$h = \sum_{i=1}^{n_K} Y_i\, h_i \qquad (5.47)$$

wobei h_i die spezifische Enthalpie der Komponente i ist.

$$h_i = h^{o}_{i,298} + \int_{298}^{T} c_{p_i}\, dT \qquad (5.48)$$

Wie schon erwähnt, wurde der molekulare Wasserstoff zum Träger der bei der Reaktion frei werdenden Bildungsenthalpie bestimmt, so daß die Bildungsenthalpien aller anderen Komponenten Null sind. Damit erhält man aus Gleichung (5.47) - (5.48) unter Beachtung von Gleichung (3.1)

$$c_p = \sum_{i=1}^{n_K} Y_i\, c_{p_i}$$

den Zusammenhang

$$h = Y_{H_2} h^{o}_{H_2,298} + \int_{298}^{T} c_p\, dT \qquad (5.49)$$

Die Temperatur wird aus der umgestellten Beziehung (5.49) bestimmt

$$F(T) = h - Y_{H_2} h^{o}_{H_2,298} - \int_{298}^{T} c_p \, dT \qquad (5.50)$$

Dazu wird auf die Funktion F(T) das Newton'sche Nullstellenverfahren angewendet

$$F(T^{(\nu)}) + (T^{(\nu+1)} - T^{(\nu)}) \frac{\partial F(T^{(\nu)})}{\partial T} = 0 \qquad (5.51)$$

wobei das hochgestellte (ν) der Näherungsindex ist. Aus Gleichung (5.51) folgt

$$T^{(\nu+1)} = T^{(\nu)} - \frac{F(T^{(\nu)})}{\frac{\partial F(T^{(\nu)})}{\partial T}} \qquad (5.52)$$

und aus Gleichung (5.50)

$$\frac{\partial F(T^{(\nu)})}{\partial T} = - c_p \qquad (5.53)$$

c_p kann mit Gleichung (3.1) und (3.2) berechnet werden. Schließlich erhält man

$$T^{(\nu+1)} = T^{(\nu)} - \frac{h - Y_{H_2} h^{o}_{H_2,298} - \int_{298}^{T} c_p \, dT}{-c_p} \qquad (5.54)$$

Das Integral $\int_{298}^{T} c_p \, dT$ kann mit Hilfe der Approximationsfunktion der Wärmekapazitäten (Gleichung (3.2)), die einmal nach T integriert wird, berechnet werden.

$$\int_{298}^{T} c_p \, dT = \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \int_{298}^{T} c_{p_i} dT$$

$$= \sum_{i=1}^{n_K} Y_i \left[A_i T + B_i (T \ln T - T) + C_i \ln T - \frac{D_i}{T}\right]_{298}^{T} \qquad (5.55)$$

Wie am Anfang dieses Abschnitts schon erwähnt wurde, soll die Funktion n-1=f(f) für diskrete f-Werte im Intervall $0 \leq f \leq 1$ ausgewertet werden. Alle Größen in Gleichung (5.54) sind eindeutige Funktionen von f. Deshalb kann die zu einem diskreten f-Wert gehörige Temperatur sofort mittels der Gleichungen (5.54), (4.17), (5.44), (5.55), (3.1), (3.2) iterativ bestimmt werden. Das so ermittelte T(f) setzt man in die nun folgende Bestimmungsgleichung für (n-1) ein, die sich ergibt, wenn man die Gleichungen (5.43)-(5.46) in das Gladstone-Dale Gesetz (1.5) einsetzt.

$$n-1 = \frac{p \{f k_{H_2} + (1-f)[k_{N_2} \tilde{Y}_{N\infty} + \tilde{Y}_{O\infty}(1{,}11\, k_{H_2O} - 0{,}126\, k_{H_2})]\}}{T(f) \{f R_{H_2} + (1-f)[R_{N_2} \tilde{Y}_{N\infty} + \tilde{Y}_{O\infty}(1{,}11\, R_{H_2O} - 0{,}126\, R_{H_2})]\}} \qquad (5.56)$$

Für die Zone II bzw. $f_{st} \leq f$ erfolgt die Herleitung entsprechend. Hier erhält man die Komponentenkonzentrationen aus den Gleichungen (5.35) - (5.37) und (4.14) - (4.16)

$$\tilde{Y}_{H_2O} = 8{,}937\, f \qquad (5.57)$$

$$\tilde{Y}_{O_2} = \tilde{Y}_{O\infty} - f(\tilde{Y}_{O\infty} + 7{,}937) \qquad (5.58)$$

$$\tilde{Y}_{N_2} = (1 - f)\tilde{Y}_{N\infty} \qquad (5.59)$$

$$Y_{H_2} = 0 \qquad (5.60)$$

Die letzte Gleichung wurde wieder der Vollständigkeit halber hinzugesetzt.

Die Bestimmung der Temperatur T(f) geschieht für einen diskreten f-Wert wiederum iterativ mit den Gleichungen (5.54), (4.17), (5.60), (5.55), (3.1) und (3.2). Mit den Gleichungen (5.57) - (5.60) erhält man aus dem Gladstone-Dale Gesetz für den Bereich $f_{st} \leq f$

$$n-1 = \frac{p\,\{f[8{,}937\,k_{H_2O} - 7{,}937\,k_{O_2}] + (1-f)[k_{O_2}\tilde{Y}_{O\infty} + k_{N_2}\tilde{Y}_{N\infty}]\}}{T(f)\,\{f[8{,}937\,R_{H_2O} - 7{,}937\,R_{O_2}] + (1-f)[R_{O_2}\tilde{Y}_{O\infty} + R_{N_2}\tilde{Y}_{N\infty}]\}} \qquad (5.61)$$

Das Ergebnis dieses Abschnitts, der funktionale Zusammenhang zwischen (n-1) und f, Y_i, T^*, ist in Bild 5.6 zu sehen. Dazu wurde f im Intervall zwischen 0 und 1 in diskreten Schritten variiert. Im Bereich $f_{st} \leq f \leq 1$ d.h. in der Zone I der Flamme in Bild 5.5, wurden zuerst aus den Gleichungen (5.43) - (5.46) die Konzentrationen Y_i bestimmt, dann konnte iterativ mit dem geschilderten Verfahren T(f) berechnet und schließlich aus der Gleichung (5.56) (n-1) ermittelt werden. Für den Bereich $0 \leq f \leq f_{st}$ bzw. der Zone II geschah dies analog mit den entsprechenden Gleichungen (5.57) - (5.61). In Bild 5.6 ist f, Y_i und T^* über (n-1) aufgetragen. Die Kurven aller Größen weisen eine Unstetigkeitsstelle auf, die die Werte in der Flammenfläche markiert und die Lösungsäste der Zone I (bzw. $0{,}3\cdot10^{-4} \leq n-1 \leq 1{,}32\cdot10^{-4}$) von denen der Zone II (bzw. $0{,}3\cdot10^{-4} \leq n-1 \leq 2{,}68\cdot10^{-4}$) trennt. Im Fall von Y_{H_2} verläuft der in der Zone II gültige Lösungsast wegen des dort geltenden $Y_{H_2} = 0$ auf der Abszisse, während dies für Y_{O_2} wegen $Y_{O_2} = 0$ in der Zone I zutrifft. Für einen aus dem Interferogramm einer H_2-Luft Diffusionsflamme bestimmten

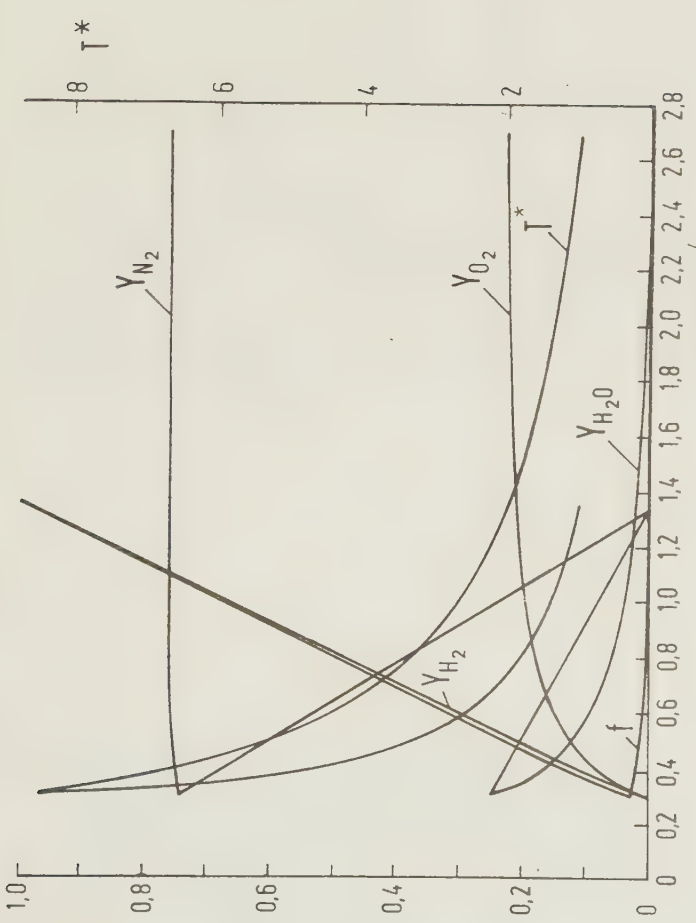


Bild 5.6 Komponentenkonzentrationen Y, Temperatur T^* und Mischungsgrad f als Funktion der Brechungsindexgröße (n-1)

(n-1) - Wert lassen sich aus Bild 5.6 sofort die zugehörigen Konzentrationen Y_{H_2}, Y_{O_2}, Y_{N_2}, Y_{H_2O} und die Temperatur T ablesen. Voraussetzung für die Wahl des richtigen Lösungsastes in Bild 5.6 ist, daß man weiß, ob der (n-1)-Wert aus dem von der Reaktionsfläche eingeschlossenen inneren Bereich (Zone I) oder aus dem äußeren Bereich (Zone II) stammt. Es sei darauf hingewiesen, daß die in Bild 5.6 dargestellten Funktionen unabhängig von der Geometrie sind und deshalb unter den Prämissen gleicher lokaler Diffusionskoeffizienten aller Komponenten, Le = 1 und Gültigkeit des Flammenflächenmodells für alle H_2-Luft Diffusionsflammen gelten.

Vergleicht man die Temperaturkurve in Bild 5.6 mit der, die sich aus der von T.P. Pandya und F.J. Weinberg [11] (siehe Einleitung) angegebenen Beziehung

$$T = T_\infty \left[\frac{(n-1)_{\infty R} + \dfrac{n_{\infty R} - n_{\infty P}}{T_{st}/T_\infty - 1}}{(n-1) + \dfrac{n_{\infty R} - n_{\infty P}}{T_{st}/T_\infty - 1}} \right] \qquad (5.62)$$

ergibt, dann zeigt sich eine gute Übereinstimmung. Gleichung (5.62) wird ebenfalls für die beiden durch die Flammenfläche getrennten Zonen unterschiedlich ausgewertet. In der Zone I ist $(n-1)_{\infty R}$ der Wert für reines H_2 bei Umgebungstemperatur, in der Zone II dagegen für Luft ebenfalls bei T_∞. Für $n_{\infty R}$ gilt entsprechendes. $n_{\infty P}$ ist der Brechungsindex der Gaszusammensetzung in der Reaktionszone (P=Produkte) bei T_∞. Die Reaktionstemperatur ist T_{st}. Die Übereinstimmung ist allerdings für den Kurvenast, der in der Zone I ($0{,}3\cdot10^{-4} \leq n-1 \leq 1{,}332\cdot10^{-4}$) gilt etwas schlechter. Hier kommen Abweichungen bis ca. 6% vor. Grund dafür ist, daß die Gleichsetzung der Reaktionszahl ε

(Anteil des umgesetzten Brennstoffes) mit dem bezogenen Temperaturanstieg

$$\varepsilon = \frac{Y_{H_2O}}{(Y_{H_2O})_{st}} = \frac{T - T_\infty}{T_{st} - T_\infty} \qquad (5.63)$$

die bei Ableitung von Gleichung (5.62) angenommen wurde, die Abhängigkeit der Wärmekapazität von der Temperatur nicht berücksichtigt. Der Vollständigkeit halber sei darauf verwiesen, daß deshalb der mit Gleichung (5.63) berechnete Verlauf von Y_{H_2O} sich erheblich von der in Bild 5.6 gezeigten Kurve unterscheidet.

6. Theoretische Berechnungen

Im Rahmen dieser Arbeit wurden sowohl der Mehrkomponenten-Freistrahl als auch die H_2-Luft Diffusionsflamme numerisch berechnet. Dies geschah vornehmlich aus zwei Gründen:

1. Es standen keine zusätzlichen Meßverfahren zur Verfügung, mit denen man die interferometrisch gewonnenen Konzentrationen und Temperaturen hätte überprüfen können. Temperaturmessungen mit Thermoelementen wären zwar mit relativ geringem Aufwand möglich gewesen, jedoch hätten nur Temperaturen bis 1900k erfaßt werden können (vgl. [25]). Deshalb wurden die Vergleichswerte durch numerische Berechnungen beschafft. Die Geschwindigkeit, die im Experiment mit einem Laser-Doppler Anemometer gemessen werden konnte, wurde als Maß für die Übereinstimmung der numerischen Ergebnisse mit dem Experiment gewählt. Die Geschwindigkeit ist ein geeigneter Indikator für die Güte der Rechnung, da sie erheblich von den Auftriebskräften und damit von der Zusammensetzung und Temperatur des Gasgemisches kontrolliert wird.

2. Mittels der numerischen Rechnung lassen sich die Auswirkungen der bei der Herleitung des Mischungsgrades f gemachten Postulate gleicher Diffusionskoeffizienten aller Komponenten und Le=1 untersuchen. Die Rechnungen wurden sowohl mit diesen Annahmen als auch mit polynärer Diffusion und Thermodiffusion sowie vollständigem Enthalpiestromvektor (Gleichung (2.4)) durchgeführt.

Die Lösung der in Kapitel 2. angegebenen parabolischen Differentialgleichungen erfolgt mit einem impliziten Differenzenverfahren in einem dem Problem besonders angepaßten Koordinatensystem.

6.1 Transformation des Gleichungssystems

Die Genauigkeit und das Konvergenzverhalten eines Differenzenverfahrens hängt erheblich von der Wahl eines geeigneten Variablensystems ab. Transformiert man die Grenzschichtgleichungen (2.1) - (2.6) auf ein Quasi-Ähnlichkeits-Koordinatensystem, dann sind die Grenzschichtdicken bei einem Vorwärtsschritt kleineren Änderungen unterworfen als im ursprünglichen Koordinatensystem, was zu einer Verringerung des Abbruchfehlers der Differenzenapproximation führt. Gleichzeitig benötigt man in Querrichtung weniger Stützstellen. Die Gleichungen (2.1) - (2.6) stellen ein durch die Stoffwerte gekoppeltes Gleichungssystem dar, das iterativ gelöst werden muß. Die Transformation beeinflußt günstig das Konvergenzverhalten des Iterationsprozesses, da die Schätzwerte, die aus den schon berechneten Lösungsprofilen ermittelt werden, näher bei den Lösungen des nächsten Vorwärtsschrittes liegen.

Die Transformation besteht aus einer Kombination von Dichte- und Ähnlichkeitstransformation, wie sie von N.Peters [13] verwendet wurde.

$$\xi = z+a \tag{6.1}$$

$$\eta = \frac{2\int_0^r \frac{\rho}{\rho_r} r\,dr}{\xi} \tag{6.2}$$

Die Größe a in Gleichung (6.1) ist der Abstand der Brennermündung zum virtuellen und singulären Ursprung des Strahls, wie er auch in der Lösung des homogenen Freistrahls von Schlichting [29] vorkommt. ρ_r ist die Dichte an einem Referenzpunkt. Für die Grenzschichtgleichungen benötigt man die Differentialoperatoren

$$\frac{\partial}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \eta}{\partial z}\frac{\partial}{\partial \eta} \tag{6.3}$$

und

$$\frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial \eta}{\partial r}\frac{\partial}{\partial \eta} = \frac{\rho r}{\rho_\infty \eta \xi^2}\frac{\partial}{\partial \eta} \tag{6.4}$$

Die Kontinuitätsgleichung (2.1) wird durch eine Stromfunktion integriert mit den Eigenschaften

$$\frac{\partial \Psi}{\partial r} = \rho u r \qquad -\frac{\partial \Psi}{\partial z} = \rho v r \tag{6.5}$$

Die Konvektionsterme der Grenzschichtgleichungen (2.2) - (2.3), (2.5) und (5.1) lassen sich durch Anwendung eines gemeinsamen Operators transformieren

$$\rho u \frac{\partial}{\partial z} + \rho v r \frac{\partial}{\partial r} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\partial \Psi}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \Psi}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \right] \tag{6.6}$$

Die transformierten Gleichungen werden je nach Verwendung in den Abschnitten 6.2.1 und 6.3.1 angegeben.

Die Stromfunktion $\Psi(r,z)$ wird durch die dimensionslose Stromfunktion $F(\eta,\xi)$ ausgedrückt

$$\Psi = \rho_\infty \nu_\infty \xi F(\eta,\xi) \tag{6.7}$$

Damit erhält man für u und v

$$u = \nu_\infty \frac{F_\eta}{\eta \xi} \tag{6.8}$$

$$v = \frac{\rho_\infty \eta_\infty}{\rho r} (\xi F_\xi + F - F_\eta \eta) \tag{6.9}$$

F_η und F_ξ bedeuten die Ableitung von F nach η bzw. ξ.

6.1.1 Eigenschaften der Transformation

Für den Fall $\rho = \rho_r$ geht Gleichung (6.2) in eine reine Ähnlichkeitstransformation über

$$\eta = \frac{r}{\xi} \tag{6.10}$$

Für diesen Fall soll gezeigt werden, welchem Einfluß eine Variation des virtuellen Abstandes a auf die Lage der Kurven η = konst im r,z Koordinatensystem hat.

Es soll nun die Gerade η_I = konst durch den virtuellen Ursprung und eine Ecke des Brennerrohres ($r = r_I$, $z = a$) verlaufen. Mit Gleichung (6.10) folgt für η_I

$$\eta_I = \frac{r_I}{a} \tag{6.11}$$

Die Gleichung der Geraden η_I = konst lautet im r,z Koordinatensystem

$$z = a \frac{r}{r_I} - a \tag{6.12}$$

Der virtuelle Abstand a gibt also die Steigung der η_I = konst Geraden an, die bei einer Variation von a um die Eckpunkte des Brennerrohres drehen. Bei einer Verkleinerung von a vergrößert sich der in Bild 6.1 schraffiert gezeichnete Bereich und umgekehrt. Zwar gilt in Flamme und Freistrahl nicht $\rho = \rho_r$ und die Kurven η_I = konst sind keiner Geraden, jedoch ändert dies nichts an der zuvor gemachten Aussage.

Das Erfassungsgebiet der Rechnung besteht nicht nur aus dem schraffierten Gebiet, sondern zusätzlich noch aus dem punktierten, das durch hinzufügen von Stützstellen zwischen η_I und η_B entsteht. Durch die Kurve $\eta=\eta_B$ wird der äußere Rand des Berechnungsgebietes festgelegt. Bei der Auswahl eines geeigneten a und der Zahl der Zusatzstützstellen ist darauf zu achten, daß das Erfassungsgebiet der Rechnung immer größer ist als das Ausbreitungsgebiet des

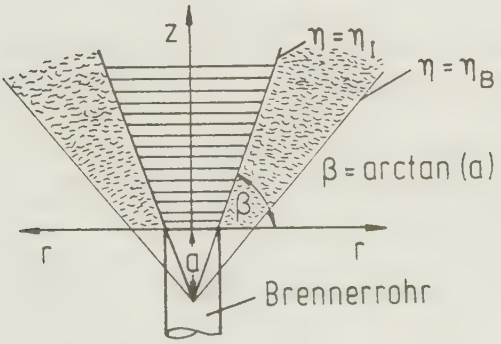


Bild 6.1 Erfassungsgebiet der Rechnung

Freistrahls bzw. der Flamme, damit die Lösung "frei" auf die äußeren Randwerte auslaufen kann und nicht auf ihr Niveau gezwungen wird. Dies kann mit einer Kontrolle der Impuls- oder Elementenbilanz überwacht werden.

Der Einfluß der Dichtetransformation $2 \int_0^r \frac{\rho}{\rho_r} \, rdr$ in Gleichung (6.2) drückt sich dadurch aus, daß die transformierte Koordinate η im Vergleich zur physikalischen Koordinate r gestreckt wird, wenn $\rho(r) < \rho_r$ ist, und gestaucht, wenn $\rho(r) > \rho_r$ gilt. Im Fall des H_2-Luft-Systems wählt man sinnvollerweise die Dichte ρ_∞ der Luft als Referenzdichte ρ_r. Dadurch erreicht man in den Bereichen geringer Dichte, d.h. hoher H_2-Konzentration, große physikalische Schrittweite, während dort, wo die Dichte infolge von Diffusion und Entstehung von Reaktionsprodukten zunimmt, die physikalische Schrittweite verringert wird. Diese gewünschten Eigenschaften hat die Transformation allerdings nur, wenn, wie im Fall H_2-Luft, der Dichteunterschied zwischen dem Gas, das aus dem Brennerrohr strömt, und der Umgebung groß ist.

In der H_2-Luft-Diffusionsflamme existieren diese Eigenschaften auch noch in der Reaktionszone, wo die Dichte im Vergleich zum Umfeld der Symmetrieachse immer noch zunimmt, obwohl die Temperatur dort ihr Maximum besitzt.

6.2 Berechnung des Mehrkomponenten-Freistrahls mit polynärer Diffusion und Auftrieb

Die Berechnung des Freistrahls bildet eine Vorstufe der Flammenberechnung. Große Teile des Rechenverfahrens sind für Freistrahl und Flamme identisch und konnten durch Vergleich der Ergebnisse mit analytischen Daten und Meßwerten erprobt werden. Läßt man z.B. statt H_2 aus dem inneren Rohr Luft strömen und wählt bei abgeschalteter Außenströmung anstelle des Parabolprofils das selbstähnliche Profil des runden homogenen Freistrahls [29] als Anfangsprofil, dann müssen alle berechneten Profile dem selbstähnlichem Profil entsprechen. Eine weitere Erprobungsmöglichkeit der Rechnung besteht darin, für einen H_2-Freistrahl, der in die ruhende Umgebungsluft ausströmt, die Erdbeschleunigung g und damit den Auftrieb "abzuschalten" und dann zu kontrollieren, ob der Impuls in beliebiger Höhe dem Anfangsimpuls entspricht.

Schließlich konnten im Experiment Geschwindigkeiten des Freistrahls mit dem Laser-Doppler-Anemometer gemessen und mit der Rechnung verglichen werden, während dies in der Flamme nur noch in begrenztem Umfang (siehe Abschn. 7.3) möglich war.

6.2.1 Transformierte Gleichungen sowie Anfangs- und Randwerte

Zur Berechnung des Mehrkomponenten-Freistrahls werden die Kontinuitätsgleichung (2.1), die Impulsgleichung (2.2) und die n_K Komponentenerhaltungsgleichungen (5.1) benötigt. Die Kontinuitätsgleichung wird, wie zuvor beschrieben, durch eine Stromfunktion integriert.

Die Impulsgleichung (2.2) lautet in transformierter Form mit der Stromfunktion F (Gleichung (6.7)) als Unbekannte

$$\xi\left[\frac{F_\eta}{\eta}\frac{\partial F_\eta}{\partial \xi} - \frac{\partial F}{\partial \xi}\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{F_\eta}{\eta}\right)\right] - \frac{\partial}{\partial \eta}\left(F\frac{F_\eta}{\eta}\right) = \frac{\partial}{\partial \eta}\left[C\eta\frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{F_\eta}{\eta}\right)\right] + \frac{\rho_\infty - \rho}{\rho}\,Gr \qquad (6.13)$$

mit dem modifizierten Chapman-Rubesin Parameter C

$$C = \frac{\rho^2 \nu \; r^2}{\rho_\infty \nu_\infty \; 2 \int_0^r \rho r dr} \tag{6.14}$$

und der Graßhoff-Zahl

$$Gr = \frac{g \; \xi^3}{\nu^2} \tag{6.15}$$

Durch die Einführung der Stromfunktion ist die Impulsgleichung (6.13) eine Differentialgleichung 3. Ordnung. Im Interesse einer einfacheren numerischen Handhabung wird Gleichung (6.13) wieder in eine parabolische Form gebracht. Dazu wird eine neue Unbekannte $\bar{u}$ definiert.

$$\bar{u} = \frac{F_\eta}{\eta} \tag{6.16}$$

mit der die transformierte Impulsgleichung nun ihre endgültige, parabolische Form erhält

$$C\frac{\partial^2 \bar{u}}{\partial \eta^2} + (\frac{\bar{v}}{\eta} + \frac{\partial C}{\partial \eta} + \frac{C}{\eta})\frac{\partial \bar{u}}{\partial \eta} - \xi \bar{u}\frac{\partial \bar{u}}{\partial \eta} + \bar{u}^2 = - \bar{\rho} Gr \tag{6.17}$$

mit den Abkürzungen

$$\bar{v} = \xi \frac{\partial F}{\partial \xi} + F \tag{6.18}$$

und

$$\bar{\rho} = \frac{\rho_\infty - \rho}{\rho} \tag{6.19}$$

Um aus der neuen Unbekannten $\bar{u}$ wieder die ursprüngliche F zu erhalten, muß nach Berechnung des Lösungsprofils von $\bar{u}$ dies gemäß

$$F = \int_0^\eta \bar{u} \eta d\eta \tag{6.20}$$

integriert werden. Die Größen C, $\bar{v}$ und $\bar{\rho}$ in Gleichung (6.17) werden als bekannt vorausgesetzt und müssen dementsprechend vor dem Lösen der Gleichung (6.17) berechnet werden.

Die Komponentenerhaltungsgleichungen (5.1) nehmen folgende transformierte Form an

$$\xi\eta\bar{u}\frac{\partial Y_i}{\partial \xi} - \bar{v}\frac{\partial Y_i}{\partial \eta} = -\frac{\partial}{\partial \eta}\left[\frac{C\eta}{\mu} J_i\right] \qquad i = 1,n_K \qquad (6.21)$$

J_i ist der transformierte Diffusionsstromvektor

$$J_i = \rho \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n_K} \frac{M_i}{\bar{M}} D_{ij} \frac{\partial}{\partial \eta}(\bar{M} Y_j) \qquad (6.22)$$

Die Differentialgleichung (6.21) ist nur von 1. Ordnung, da wegen der Summationsvorschrift $j\neq i$ in Gleichung (6.22) die Unbekannte y_i der Gleichung (6.21) auf ihrer rechten Seite nicht in Erscheinung tritt. Mit Hilfe eines Kunstgriffes wird diese Gleichung nun ebenfalls in eine parabolische Form gebracht: zum molekularen Diffusionsstrom J_i wird ein fiktiver Diffusionsstrom J_{fi}, den man auch als "mathematischen Diffusionsstrom" bezeichnen könnte,

$$J_{fi} = D_{fi}\frac{\partial Y_i}{\partial \eta} \qquad (6.23)$$

addiert und gleichzeitig subtrahiert, sodaß sich der Wert von Gleichung (6.21) nicht ändert.

$$\xi\eta\bar{u}\frac{\partial Y_i}{\partial \xi} - \bar{v}\frac{\partial Y_i}{\partial \eta} = -\frac{\partial}{\partial \eta}\left[\frac{C\eta}{\mu} J_i + \eta(J_{fi} - J_{fi})\right] \qquad i = 1,n_K \qquad (6.24)$$

Der fiktive Diffusionsterm mit dem positiven Vorzeichen wird nun auf die linke Seite von Gleichung (6.24) gebracht und mit Gleichung (6.22) - (6.23) erhält man schließlich die parabolische Differentialgleichung.

$$D_{fi}\frac{\partial^2 Y_i}{\partial \eta^2} + \frac{(\bar{v} + D_{fi})}{\eta}\frac{\partial Y_i}{\partial \eta} - \xi \bar{u}\frac{\partial Y_i}{\partial \xi} = \frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial \eta}\left[\frac{C\eta}{\mu} J_i - \eta D_{fi}\frac{\partial Y_i}{\partial \eta}\right] \quad (6.25)$$

$$i = 1, n_K$$

Die rechte Seite von Gleichung (6.25) ist als inhomogen zu betrachten und muß für jede der n_k Komponentenerhaltungsgleichungen zu Beginn eines Iterationsprozesses vorgegeben werden. Anschließend wird sie zur Iterationsgröße bis sich die Konvergenz des Gleichungssystems (6.25) einstellt. Voraussetzung für die Konvergenz ist die Wahl eines geeigneten konstanten, fiktiven Diffusionskoeffizienten D_{fi}. Ein zu kleines D_{fi} läßt die Gleichung (6.25) entarten und ein zu großes führt zu Lösungen, die nichts mit einer physikalisch sinnvollen Lösung zu tun haben. Dazwischen liegt aber ein breiter Spielraum, und bei der Bestimmung von D_{fi} kann man sich von der Vorstellung leiten lassen, daß der fiktive und molekulare Diffusionsstrom in etwa gleich groß sein müssen

$$D_{fi}\frac{\partial Y_i}{\partial \eta} \approx J_i(\eta)$$

Die Anfangswerte (2.7)-(2.10) und (2.13)-(2.16) lauten in transformierter Form

$$\xi = 0$$

$$0 \leq \eta \leq \eta_I$$

$$\bar{u} = \frac{a}{\nu_\infty} u_o \left(1-\left(\frac{\eta}{\eta_I}\right)^2\right) \quad (6.26)$$

$$Y_{H_2} = 1 \quad (6.27)$$

$$Y_{O_2} = 0 \quad (6.28)$$

$$Y_{N_2} = 0 \quad (6.29)$$

$\xi = 0$

$\eta_I < \eta \leq \eta_A$

$$\bar{u} = \frac{a}{v_\infty} u_A \left(1 - \left(\frac{(a^2(\eta^2 - \eta_I^2) + r_I^2)^{0,5} - r_I}{r_A - r_I}\right)^2\right) \quad \text{für } \eta_I \leq \eta \leq \eta_B$$

und

$$\bar{u} = \frac{a}{v_\infty} u_A \qquad \text{für } \eta > \eta_B \tag{6.30}$$

$$Y_{H_2} = 0 \tag{6.31}$$

$$Y_{O_2} = 0{,}232 \tag{6.32}$$

$$Y_{N_2} = 0{,}768 \tag{6.33}$$

Für die Randbedingungen (2.19)-(2.22) ergibt sich

$\xi > a$

$\eta = 0$	$\eta = \eta_A$	
$\frac{\partial \bar{u}}{\partial \eta} = 0$	$\bar{u} = \frac{u_A}{v_\infty}\xi$	(6.34)
$\frac{\partial Y_{H_2}}{\partial \eta} = 0$	$Y_{H_2} = 0$	(6.35)
$\frac{\partial Y_{O_2}}{\partial \eta} = 0$	$Y_{O_2} = 0{,}232$	(6.36)
$\frac{\partial Y_{N_2}}{\partial \eta} = 0$	$Y_{N_2} = 0{,}768$	(6.37)

6.2.2. Diskretisierung des Gleichungssystems

Zur numerischen Integration der Grenzschichtgleichungen wird ein Differenzenverfahren verwendet, das entsprechend dem parabolischen Typ der Gleichungen implizit ist (vgl.[30]). Das implizite Differenzenverfahren führt in Querrichtung (η-Richtung) auf ein gekoppeltes algebraische Gleichungssystem, während in Vorwärtsrichtung schrittweise mit der Rechnung vorgerückt werden kann.

Ein Maß für die Güte einer Differenzenapproximation ist der Abbruchfehler, der entsteht, wenn man den Differentialoperator durch einen Differenzenoperator annähert. Es gibt eine Reihe von Verfahren, die einen sehr kleinen Abbruchfehler aufweisen, so ist z.B. der Abbruchfehler des Mehrstellenverfahrens von Collatz [31] , des Kollokationsverfahrens von Falk [32] oder des formalisierten OCI-Verfahrens [33] von 4. Ordnung. Die Vorteile dieser Verfahren liegen in einer Verringerung der Stützstellen (geringer Speicherbedarf) und der Rechenzeit bei gleichbleibender Genauigkeit. Diese Vorteile werden aber durch einen erhöhten Aufwand bei der Formulierung der Differenzgleichung bzw. der Programmierung erkauft sowie häufig durch ein weniger "robustes" Lösungsverhalten. Deshalb wurde für die Diskretisierung ein Verfahren gewählt, das zwar nur einen Abbruchfehler von 2. Ordnung in beiden Koordinatenrichtung $(\Delta\eta)^2$ und $(\Delta\xi)^2$ besitzt, dafür aber kurz in der Formulierung und einfach in der Handhabung ist.

Es wird ein Differenzenmolekül gewählt, das aus den fünf Stützstellen

$$(\xi_{m-2},\eta_n) \ , \ (\xi_{m-1},\eta_n) \ , \ (\xi_m,\eta_{n-1}) \ , \ (\xi_m,\eta_n) \ , \ (\xi_m,\eta_{n+1}) \qquad (6.38)$$

besteht, deren Abstand nicht äquidistant sein muß (vgl.[34]).

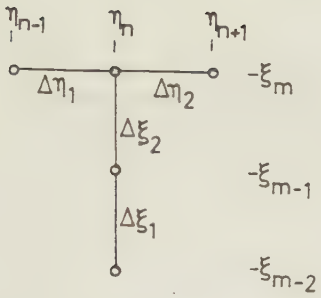


Bild 6.2 Differenzenmolekül

Der Verlauf der Lösung zwischen den Stützstellen wird durch jeweils ein Lagrang'sches Interpolationspolynom für die η- und ξ-Richtung approximiert, mit den Stützwerten

$$S_{m-2,n}\ ,\ S_{m-1,n}\ ,\ S_{m,n-1}\ ,\ S_{m,n}\ ,\ S_{m,n+1} \tag{6.39}$$

in den Stützstellen.

$$\begin{aligned}\Sigma(\xi,\eta) = {} & \frac{(\xi-\xi_m)(\xi-\xi_{m-1})}{(\xi_{m-2}-\xi_{m-1})(\xi_{m-2}-\xi_m)} S_{m-2,n} + \\ & \frac{(\xi-\xi_{m-2})(\xi-\xi_m)}{(\xi_{m-1}-\xi_{m-2})(\xi_{m-1}-\xi_m)} S_{m-1,n} + \\ & (\xi-\xi_m)\frac{(\xi-\xi_{m-1})(\xi-\xi_{m-2})}{(\xi_m-\xi_{m-1})(\xi_m-\xi_{m-2})} S_{m,n} + \\ & \frac{(\eta-\eta_n)(\eta-\eta_{n+1})}{(\eta_{n-1}-\eta_n)(\eta_{n-1}-\eta_{n+1})} S_{m,n-1} + \\ & \frac{(\eta-\eta_{n-1})(\eta-\eta_{n+1})}{(\eta_n-\eta_{n-1})(\eta_n-\eta_{n+1})} S_{m,n} + \\ & \frac{(\eta-\eta_{n-1})(\eta-\eta_n)}{(\eta_{n+1}-\eta_{n-1})(\eta_{n+1}-\eta_n)} S_{m,n+1}\end{aligned}$$

$$= \Sigma_1(\xi) + \Sigma_2(\eta) \tag{6.40}$$

In den Grenzschichtgleichungen (6.17) und (6.25) treten die Differentialoperatoren $\frac{\partial}{\partial \eta}$, $\frac{\partial^2}{\partial \eta^2}$ und $\frac{\partial}{\partial \xi}$ auf. Entsprechend wird gebildet

$$\Sigma_{\eta} = \Sigma_{2\eta}$$

$$\Sigma_{\eta\eta} = \Sigma_{2\eta\eta}$$

$$\Sigma_{\xi} = \Sigma_{1\xi} \tag{6.41}$$

bzw. ausgeschrieben

$$\begin{aligned}\Sigma_{2\eta} = {} & \frac{(\eta-\eta_n) + (\eta-\eta_{n+1})}{(\eta_{n-1}-\eta_n)(\eta_{n-1}-\eta_{n+1})} S_{m,n-1} + \\ & \frac{(\eta-\eta_{n-1}) + (\eta-\eta_{n+1})}{(\eta_n-\eta_{n-1})(\eta_n-\eta_{n+1})} S_{m,n} + \\ & \frac{(\eta-\eta_{n-1}) + (\eta-\eta_n)}{(\eta_{n+1}-\eta_{n-1})(\eta_{n+1}-\eta_n)} S_{m,n+1} \\ = {} & \Lambda_{I\eta} S_{m,n-1} + \Lambda_{II\eta} S_{m,n} + \Lambda_{III\eta} S_{m,n+1}\end{aligned} \tag{6.42}$$

$$\begin{aligned}\Sigma_{2\eta\eta} = {} & \frac{2}{(\eta_{n-1}-\eta_n)(\eta_{n-1}-\eta_{n+1})} S_{m,n-1} + \\ & \frac{2}{(\eta_n-\eta_{n-1})(\eta_n-\eta_{n+1})} S_{m,n} + \\ & \frac{2}{(\eta_{n+1}-\eta_{n-1})(\eta_{n+1}-\eta_n)} S_{m,n+1} \\ = {} & \Lambda_{I\eta\eta} S_{m,n-1} + \Lambda_{II\eta\eta} S_{m,n} + \Lambda_{III\eta\eta} S_{m,n+1}\end{aligned} \tag{6.43}$$

$$\Sigma_{1\xi} = \frac{(\xi-\xi_m) + (\xi-\xi_{m-1})}{(\xi_{m-2}-\xi_m)(\xi_{m-2}-\xi_{m-1})} S_{m-2,n} +$$

$$\frac{(\xi-\xi_{m-2}) + (\xi-\xi_m)}{(\xi_{m-1}-\xi_{m-2})(\xi_{m-1}-\xi_m)} S_{m-1,n} +$$

$$\frac{4\xi-2\xi_m-\xi_{m-1}-\xi_{m-2}}{(\xi_m-\xi_{m-1})(\xi_m-\xi_{m-2})} S_{m,n}$$

$$= \Lambda_{I\xi} S_{m-2,n} + \Lambda_{II\xi} S_{m-1,n} + \Lambda_{III\xi} S_{m,n} \qquad (6.44)$$

Nun kann die finite Übersetzung der Impulsgleichung (6.17) und der Elementenerhaltungsgleichung (6.25) durchgeführt werden.

Die diskrete Impulsgleichung entsteht dadurch, daß man in Gleichung (6.17) die Differentialoperatoren durch die Ausdrücke (6.41) ersetzt und die so entstandene Gleichung für die Stützstelle (ξ_m, η_n) anschreibt.

$$C_{m,n}\Sigma_{2\eta\eta,n} + W_{m,n}\Sigma_{2\eta,n} - \xi_m \bar{u}_{m,n}\Sigma_{1\xi,m} + \bar{u}^2_{m,n} = -(\bar{p}Gr)_{m,n} \tag{6.45}$$

mit der Abkürzung

$$W = \left(\frac{\bar{v}}{\eta} + \frac{\partial C}{\partial \eta} + \frac{C}{\eta} \right) \tag{6.46}$$

Die quadratischen Glieder in Gleichung (6.45) (neben $\bar{u}^2_{m,n}$ entsteht noch ein zweites, wenn der Term $\xi_m \bar{u}_{m,n}\Sigma_{1\xi,m}$ ausgeschrieben wird) werden durch folgenden Ansatz linearisiert, wobei $\bar{u}^*$ ein Schätzwert und $\Delta\bar{u}$ eine kleine Größe ist.

$$\begin{aligned} \bar{u}^2_{m,n} &= (\bar{u}^* + \Delta\bar{u})^2 \\ &= \bar{u}^{*2} + 2\bar{u}^*\Delta\bar{u} + \Delta\bar{u}^2 \\ &= \bar{u}^{*2} + 2\bar{u}^*\Delta\bar{u} + 2\bar{u}^{*2} - 2\bar{u}^{*2} \\ &= 2\bar{u}_{m,n}\bar{u}^* - \bar{u}^{*2} \end{aligned} \tag{6.47}$$

Mit den Gleichungen (6.41) - (6.44) und (6.47) erhält man aus (6.45) die endgültige Form der nach Stützwerten geordneten finiten Impulsgleichung.

$$\begin{aligned} &\bar{u}_{m,n-1}\,[C_{m,n}\Lambda_{I\eta\eta,n} + W_{m,n}\Lambda_{I\eta,n}] + \\ &\bar{u}_{m,n}\,[C_{m,n}\Lambda_{II\eta\eta,n} + W_{m,n}\Lambda_{II\eta,n} + 2\bar{u}^*(1-\xi_m\Lambda_{III\xi,m}) - \\ &\qquad \xi_m(\Lambda_{II\xi,m}\bar{u}_{m-1,n} + \Lambda_{I\xi,m}\bar{u}_{m-2,n})] + \\ &\bar{u}_{m,n+1}\,[C_{m,n}\Lambda_{III\eta\eta,n} + W_{m,n}\Lambda_{III\eta,n}] \\ &= \bar{u}^{*2}(1-\xi_m\Lambda_{III\xi,m}) - (\bar{p}\,Gr)_{m,n} \end{aligned} \tag{6.48a}$$

oder in kürzerer Schreibweise:

$$\bar{u}_{m,n-1}\, A_{m,n} + \bar{u}_{m,n}\, B_{m,n} + \bar{u}_{m,n+1}\, C_{m,n} = D_{m,n} \qquad (6.48b)$$

Bei der finiten Übersetzung der Komponentenerhaltungsgleichungen wird analog vorgegangen. In Gleichung (6.25) werden die Differenzenausdrücke (6.41) eingesetzt

$$D_{fi}\Sigma_{2\eta\eta,n} + \frac{\bar{v}_{m,n} + f_i}{\eta_n}\Sigma_{2\eta,n} - \xi_m \bar{u}_{m,n}\,\Sigma_{1\xi,m}$$

$$= \frac{1}{\eta_n}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[\frac{C\eta}{\nu} J_i - \eta D_{fi}\frac{\partial Y_i}{\partial\eta}\right]_{m,n} \qquad (6.49)$$

$$i = 1, n_K$$

Die Indizes m und n bedeuten wiederum, daß die Gleichung für die Stützstelle ξ_m, η_n angeschrieben wird. Unter Verwendung von Gleichung (6.42) - (6.44) erhält man die nach Stützwerten geordneten finiten Komponentenerhaltungsgleichungen

$$Y_{i_{m,n-1}}\left[D_{fi}\Lambda_{I\eta\eta,n} + \frac{\bar{v}_{m,n} + D_{fi}}{\eta_n}\Lambda_{I\eta,n}\right] +$$

$$Y_{i_{m,n}}\left[D_{fi}\Lambda_{II\eta\eta,n} + \frac{\bar{v}_{m,n} + D_{fi}}{\eta_n}\Lambda_{II\eta,n} - \xi_m \bar{u}_{m,n}\Lambda_{III\xi,m}\right] +$$

$$Y_{i_{m,n+1}}\left[D_{fi}\Lambda_{III\eta\eta,n} + \frac{\bar{v}_{m,n} + D_{fi}}{\eta_n}\Lambda_{III\eta,n}\right]$$

$$= \frac{1}{\eta_n}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[\frac{C\eta}{\nu} J_i - \eta D_{fi}\frac{\partial Y_i}{\partial\eta}\right]_{m,n} + \xi_m \bar{u}_{m,n}\left[\Lambda_{I\xi,m} Y_{j_{m-2,n}} + \Lambda_{II\xi,m} Y_{i_{m-1,n}}\right]$$

$$i = 1, n_K \qquad (6.50a)$$

oder in Kurzform

$$Y_{i_{m,n-1}}\, A_{m,n} + Y_{i_{m,n}}\, B_{m,n} + Y_{i_{m,n+1}}\, C_{m,n} = D_{m,n} \qquad (6.50b)$$

Die in Gleichung (6.48) und (6.50) auftretenden Größen

$$\Lambda_{I\eta,n}\ ,\ \Lambda_{II\eta,n}\ ,\ \Lambda_{III\eta,n}\ ,\ \Lambda_{I\eta\eta,n}\ ,\ \Lambda_{II\eta\eta,n}\ ,\ \Lambda_{III\eta\eta,n}\ ,$$

$$\Lambda_{I\xi,m}\ ,\ \Lambda_{II\xi,m}\ ,\ \Lambda_{III\xi,m}$$

müssen noch ausgewertet werden. Dazu wird in Gleichung (6.41) und (6.42) die freie Variable η durch η_n ersetzt und in Gleichung (6.42) ξ durch ξ_m. Benutzt man die in Bild 6.2 angegebenen Schrittweiten

$$\begin{aligned}
\Delta\eta_1 &= \eta_n - \eta_{n-1} \\
\Delta\eta_2 &= \eta_{n+1} - \eta_n \\
\Delta\xi_1 &= \xi_{m-1} - \xi_{m-2} \\
\Delta\xi_2 &= \xi_m - \xi_{m-1}
\end{aligned} \tag{6.51}$$

dann erhält man

$$\Lambda_{I\eta,n} = -\frac{\Delta\eta_2}{\Delta\eta_1(\Delta\eta_1 + \Delta\eta_2)}$$

$$\Lambda_{II\eta,n} = \frac{\Delta\eta_2 - \Delta\eta_1}{\Delta\eta_1\ \Delta\eta_2}$$

$$\Lambda_{III\eta,n} = \frac{\Delta\eta_1}{\Delta\eta_2(\Delta\eta_1 + \Delta\eta_2)}$$

$$\Lambda_{I\eta\eta,n} = \frac{2}{\Delta\eta_1(\Delta\eta_1 + \Delta\eta_2)}$$

$$\Lambda_{II\eta\eta,n} = \frac{-2}{\Delta\eta_1\ \Delta\eta_2}$$

$$\Lambda_{III\eta\eta,n} = \frac{2}{\Delta\eta_2(\Delta\eta_1 + \Delta\eta_2)}$$

$$\Lambda_{I\xi,m} = \frac{\Delta\xi_2}{\Delta\xi_1(\Delta\xi_1 + \Delta\xi_2)}$$

$$\Lambda_{II\xi,m} = -\frac{\Delta\xi_1 + \Delta\xi_2}{\Delta\xi_1\,\Delta\xi_2}$$

$$\Lambda_{III\xi,m} = \frac{\Delta\xi_1 + 2\Delta\xi_2}{\Delta\xi_2(\Delta\xi_1 + \Delta\xi_2)} \qquad (6.52)$$

Damit ist die Diskretisierung des Differentialgleichungssystem des Mehrkomponenten-Freistrahls abgeschlossen.

6.2.3. Lösung des algebraischen Gleichungssystems

Bezeichnet man die Zahl der Stützstellen in η-Richtung mit N, dann lassen sich die Differenzgleichungen (die finite Impulsgleichung (6.48b), die finiten Elementenerhaltungsgleichungen, (6.50b) bzw. im Fall der Flammenrechnung, die Elementenerhaltungsgleichungen (6.81b) und die Enthalpiegleichung (6.82b)) entsprechend der Form des Differenzenmoleküls (Bild 6.2) für die N-2 inneren Stützstellen anschreiben. Weil jedoch lediglich der äußere Randwert S_n (vgl. Abschnitt 2.1) bekannt ist, gibt es N-1 unbekannte Stützwerte, zu deren Bestimmung die N-2 algebraischen Gleichungen nicht ausreichen. Die notwendige zusätzliche Gleichung wird aus der Bedingung gewonnen, daß die Steigung aller Lösungen auf der Symmetrieachse Null ist. Zur Approximation der Ableitungen (6.34)-(6.37) wird ein Lagrang'sches Interpolationspolynom 3. Ordnung einmal differenziert und für die Stelle $\eta = 0$ angeschrieben

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \eta}\right)_{\eta=0} \simeq -\frac{11}{6\Delta\eta} S_1 + \frac{3}{\Delta\eta} S_2 - \frac{1,5}{\Delta\eta} S_3 + \frac{1}{3\Delta\eta} S_4 = 0 \qquad (6.53a)$$

bzw. in Kurzform

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \eta}\right)_{\eta=0} \simeq E\, S_1 + F\, S_2 + G\, S_3 + H\, S_4 = 0 \qquad (6.53b)$$

Gleichung (6.53) setzt äquidistante Schrittweiten $\Delta\eta$ voraus, ihr formaler Abbruchfehler ist von 3. Ordnung. Aus den Differenzengleichungen erhält man ein algebraisches Gleichungssystem, das bis auf die 1. Zeile, die von Gleichung (6.53) gebildet wird, tridiagonal ist.

$$\begin{vmatrix} E & F & G & H & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & & \\ & A_3 & B_3 & C_3 & & \\ & & & & & \\ & & & A_{N-1} & B_{N-1} & \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ \\ S_{N-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 0 \\ D_2 \\ D_3 \\ \\ (D_{n-1} - C_{N-1} \cdot S_N) \end{vmatrix}$$

(6.54)

In dem Schema (6.54) wurde der Index m der in dem Differenzengleichungen auftretenden Koeffizienten $A_{m,n}$, $B_{m,n}$, $C_{m,n}$, $D_{m,n}$ weggelassen. Zur Lösung des Gleichungsschemas (6.54) ist es vorteilhaft, dies zuerst in tridiagonale Form zu bringen, wozu die Koeffizienten G und H eleminiert werden müssen. Analog zum Gauß-Algorithmus geschieht dies mit Hilfe der Zeilen 3 und 2. Die dabei neu entstehenden Koeffizienten der 1. Zeile werden mit B_1, C_1 und D_1 bezeichnet

$$\begin{vmatrix} B_1 & C_1 & & & & \\ A_2 & B_2 & C_2 & & & \\ & A_3 & B_3 & C_3 & & \\ & & & & & \\ & & & A_{N-1} & B_{N-1} & \end{vmatrix} \cdot \begin{vmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ \\ S_{N-1} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} D_1 \\ D_2 \\ D_3 \\ \\ (D_{N-1} - C_{N-1} \cdot S_N) \end{vmatrix}$$

(6.55)

Die Lösung des Gleichungssystems (6.55) erfolgt mit einem Rekursionsverfahren, einer von Thomas angegeben Form des Gauß'-Algorithmus für tridiagonale Systeme [35] . Die Unbekannte S_n erhält man aus

$$S_n = \frac{C_n}{\beta_n} S_{n+1} + \gamma_n \qquad (6.56)$$

wenn die Größen β_n und γ_n bekannt sind. Für n=1 gilt

$$\beta_1 = B_1$$

$$\gamma_1 = \frac{D_1}{B_1} \qquad (6.57)$$

und für $2 < n < N-1$

$$\beta_n = B_n - \frac{A_n C_{n-1}}{\beta_{n-1}}$$

$$\gamma_n = \frac{D_n - A_n \gamma_{n-1}}{\beta_n} \qquad (6.58)$$

Zuerst bestimmt man für n = 1 bis n = N-1 die β_n und γ_n und kann dann mit Gleichung (6.56) bei n = N-1 beginnend die unbekannten Stützwerte S_n berechnen.

6.2.4 Der Lösungsalgorithmus

Die Impulsgleichung (6.17) bzw. (6.48) und dieKomponenten-erhaltungsgleichungen (6.25) bzw. (6.50) stellen ein System gekoppelter Differentialgleichungen dar, das iterativ gelöst werden muß. Der Iterationsprozeß vollzieht sich auf zwei Ebenen:

- Der Ebene der Gleichungsiteration , in der zum einen die Impulsgleichung, zum anderen das System n_K Komponenten-erhaltungsgleichungen zur Konvergenz gebracht werden. Die Iteration der Impulsgleichung (6.17) ist notwendig, weil sie die nicht-lineare Terme $\xi\bar{u}\,\frac{\partial\bar{u}}{\partial\xi}$ und $\bar{u}^2$, sowie den quasi-linearen Term $\bar{v}$ (Gleichung (6.18)) enthält. Die Komponentenerhaltungsgleichungen (6.25) müssen infolge der Kopplung ihrer rechten Seiten iteriert werden.

- Der Ebene der Gesamtiteration, in der die Kopplung zwischen der Impulsgleichung und den Komponentener-haltungsgleichungen berücksichtigt wird. In der Impuls-gleichung werden der Chapman-Rubesin Parameter C (Gleichung (6.14)), die Dichte $\bar{\rho}$ (Gleichung (6.19)) und die Graßhoff-Zahl Gr (Gleichung (6.15)) von der Lösung der Komponentenerhaltungsgleichungen bestimmt, während in diesen die Größen $\bar{u}$ und $\bar{v}$ von der Lösung der Impuls-gleichung abhängen.

Der Algorithmus des Freistrahlprogramms wird in Bild 6.3 gezeigt. Einzelheiten zur numerischen Berechnung können dem Anhang entnommen werden.

Nach dem Programmstart werden Vorgaben für $C, \frac{\partial C}{\partial\eta}$, $\bar{v}$, $\bar{u}^*$, $\bar{\rho}$, Gr gemacht, die sich für die erste Lösungsebene aus den Anfangsbedingungen (6.26) - (6.33) ergeben. Im Anschluß daran wird aus der finiten Impulsgleichung das Lösungsprofil von $\bar{u}$ ermittelt, aus dem ein neues $\bar{v}$ berechnet wird. Die gefundenen

Lösungen $\bar{u}$ werden als Schätzwert $\bar{u}^*$ gewählt, und die nächste Impulsiteration wird gestartet. Wenn sich Konvergenz für $\bar{u}$ eingestellt hat, wird mit der Berechnung der Konzentrationen Y_i aus den finiten Komponontenerhaltungsgleichungen fortgefahren. Die neu entwickelte Zusammensetzung des Gasgemisches hat eine Veränderung der von den Stoffwerten bestimmten Größen $C, \frac{\partial C}{\partial \eta}, \bar{\rho}$, Gr zur Folge. Nach Bestimmung der von der Diffusion geprägten rechten Seite der Komponentenerhaltungsgleichungen wird der nächste Komponenteniterationsdurchlauf begonnen. Hat sich schließlich Konvergenz der Y_i eingestellt, dann beginnt die nächste Gesamtiteration, wobei als Vorgabe für $C, \frac{\partial C}{\partial \eta}, \bar{v}, \bar{u}^*, \bar{\rho}$, Gr die zuletzt berechneten Werte genommen werden. Gesamtkonvergenz ist dann gegeben, wenn $\bar{u}$ im Rahmen der Gesamtiteration konvergent ist. Anschließend wird der Berechnungsablauf für den nächsten Vorwärtsschritt durchgeführt.

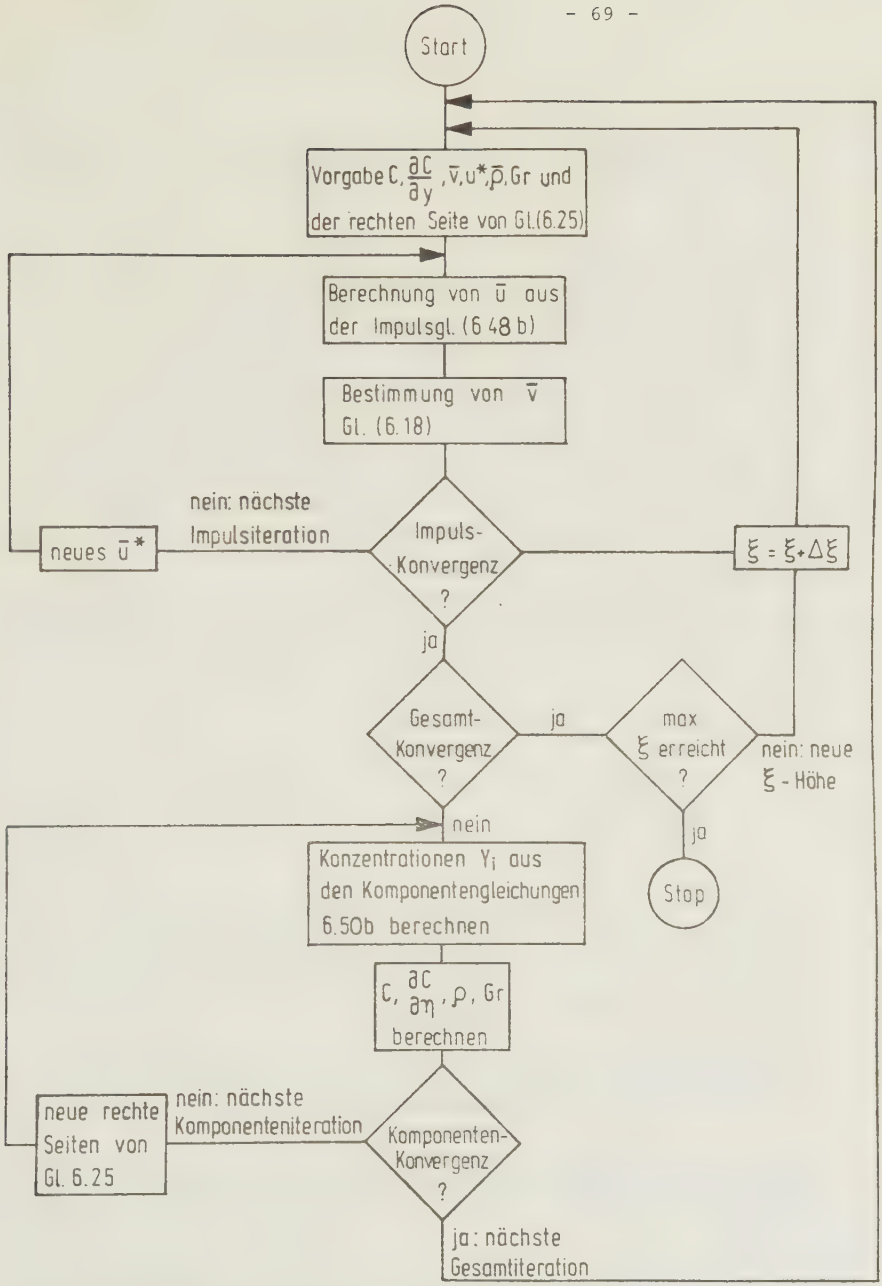


Bild 6.3: Algorithmus des Freistrahlprogramms

6.3 Berechnung der H_2-Luft-Diffusionsflamme

Das Berechnungsverfahren für die H_2-Luft-Diffusionsflamme basiert auf dem des Mehrkomponenten-Freistrahls. Die Impulsgleichung (6.17) bzw. (6.48) wird in unveränderter Form übernommen. Anstelle der n_K Komponentenerhaltungsgleichungen (6.21) bzw. (6.50) werden n_E Elementenerhaltungsgleichungen gelöst. Die Komponentenkonzentrationen werden anschließend mit Hilfe der in Abschnitt 5.2.1 aus dem Flammenflächenmodell hergeleiteten Beziehungen aus den Elementenkonzentrationen bestimmt. Als zusätzliche Differentialgleichung muß die Energiegleichung in Enthalpieform (2.3) gelöst werden, aus deren Lösung die Temperatur berechnet wird.
In den folgenden Abschnitten werden nun die Zusammenhänge beschrieben, die sich gegenüber der Freistrahlberechnung verändert haben oder in ihr nicht enthalten waren.

6.3.1 Transformierte Gleichungen sowie Anfangs- und Randbedingungen

Ein Vergleich der Komponentenerhaltungsgleichung (5.1) mit der Elementenerhaltungsgleichung (2.5) zeigt, daß letztere aus der ersteren hervorgeht, wenn man die Y_i durch $\tilde{Y}_k$ und j_i durch $\sum_{i=1}^{n_K} \frac{a_{ik}\tilde{M}_k}{M_i} j_i$ ersetzt. Analog dazu erhält man aus der transformierten Komponentenerhaltungsgleichung (6.25) die transformierte Elementenerhaltungsgleichung

$$\rho_{fi}\frac{\partial^2\tilde{Y}_k}{\partial\eta^2} + \frac{\bar{v} + v_{fi}}{\eta}\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial\eta} - \xi\bar{u}\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial\xi} = \frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[\frac{C\eta}{\sigma}\sum_{i=1}^{n_K}\frac{a_{ik}\tilde{M}_k}{M_i}J_i - \eta\rho_{fi}\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial\eta}\right]$$

$$k = 1, n_E \qquad (6.59)$$

Der transformierte Diffusionsstromvektor J_i enthält entsprechend der Gleichung (2.6) neben der molekularen Diffusion auch die Thermodiffusion

$$J_i = \rho \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n_K} \frac{M_i}{\bar{M}^2} D_{ij} \frac{\partial}{\partial \eta}(\bar{M} Y_j) - \frac{D_i^T}{T} \frac{\partial T}{\partial \eta} \qquad (6.60)$$

In Gleichung (6.60) werden die Lewis-Zahlen

$$Le_{ij} = \frac{\rho D_{ij} c_p}{\lambda} \qquad (6.61)$$

$$Le_i^T = \frac{D_i^T c_p}{\lambda} \qquad (6.62)$$

eingeführt, wodurch der Diffusionsstromvektor $\hat{J}_i$ ensteht

$$\hat{J}_i = \rho \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n_K} \frac{M_i}{\bar{M}^2} Le_{ij} \frac{\partial}{\partial \eta}(\bar{M} Y_j) - Le_i^T \frac{\partial T}{\partial \eta} \qquad (6.63)$$

der mit J_i im Zusammenhang

$$J_i = \frac{\lambda}{c_p} \hat{J}_i \qquad (6.64)$$

steht. Zusammen mit der Prandtl-Zahl

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda} \qquad (6.65)$$

und Gleichung (6.63) - (6.65),erhält man aus Gleichung (6.59) die endgültige transformierte Elementenerhaltungsgleichung

$$D_{fi} \frac{\partial^2 \tilde{Y}_k}{\partial \eta^2} + \frac{\bar{v} + D_{fi}}{\eta} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \eta} - \xi \bar{u} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \xi} = \frac{1}{\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{C\eta}{Pr} \sum_{i=1}^{n_K} \frac{a_{ik} \tilde{M}_k}{M_i} \hat{J}_i - \eta D_{fi} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \eta} \right]$$

$$k = 1, n_E \qquad (6.66)$$

Die Elementenkonzentrationen $\tilde{Y}_k$ werden aus den n_E Elementenerhaltungsgleichungen (6.66) berechnet. Der Ort der Reaktion befindet sich dort, wo die Bedingung $\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H} = 7{,}937$ (Gleichung (5.23)) erfüllt ist. In der Reaktionsfläche lassen sich die Komponentenkonzentrationen Y_i mit den Beziehungen (5.24) - (5.27) bestimmen. In der Zone I (Bild 5.4), in der $\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H} < 7{,}937$ gilt, werden die Gleichungen (5.28) - (5.29) und (5.32) - (5.33), in der Zone II bzw. $\frac{\tilde{Y}_O}{\tilde{Y}_H} > 7{,}937$ die Gleichungen (5.34) - (5.37) verwendet.

Die Enthalpiegleichung (2.3) lautet in transformierter Form

$$\frac{C}{Pr}\frac{\partial^2 h}{\partial \eta^2} + W\frac{\partial h}{\partial \eta} - \xi \bar{u}\frac{\partial h}{\partial \xi} = \frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial \eta}\left[\frac{C\,\eta}{Pr}\sum_{i=1}^{n_K} h_i\left(\hat{J}_i + \frac{\partial Y_i}{\partial \eta}\right)\right] \qquad (6.67)$$

mit

$$W = \frac{\bar{v}}{\eta} + \frac{\partial}{\partial \eta}\left(\frac{C}{Pr}\right) + \frac{C}{\eta Pr} \qquad (6.68)$$

Die Bestimmung der Temperatur aus der Enthalpie erfolgt analog zum Vorgehen in Abschnitt 5.2.2.

Die transformierten Anfangs- und Randbedingungen können unverändert vom Freistrahl übernommen werden (Gleichung (6.26),(6.30) und (6.34)). Die transformierten Anfangsbedingungen der Elementenkonzentrationen und der Enthalpie lauten:

$\xi = 0$
$0 \le \eta \le \eta_I$

$$\tilde{Y}_H = 1 \qquad (6.69)$$

$$\tilde{Y}_O = 0 \qquad (6.70)$$

$$\tilde{Y}_N = 0 \tag{6.71}$$

$$h = h^o_{H_2,298} \tag{6.72}$$

$$\eta_I < \eta \leq \eta_B$$

$$\tilde{Y}_H = 0 \tag{6.73}$$

$$\tilde{Y}_O = 0{,}232 \tag{6.74}$$

$$\tilde{Y}_N = 0{,}768 \tag{6.75}$$

$$h = 0 \tag{6.76}$$

Für die transformierten Randbedingungen ergibt sich

$$\xi = a$$

$\eta = 0$	$\eta = \eta_A$	
$\frac{\partial \tilde{Y}_H}{\partial \eta} = 0$	$\tilde{Y}_H = 0$	(6.77)
$\frac{\partial \tilde{Y}_O}{\partial \eta} = 0$	$\tilde{Y}_O = 0{,}232$	(6.78)
$\frac{\partial \tilde{Y}_N}{\partial \eta} = 0$	$\tilde{Y}_N = 0{,}768$	(6.79)
$\frac{\partial h}{\partial \eta} = 0$	$h = 0$	(6.80)

6.3.2 Finite Gleichungen

Die finiten Elementenerhaltungsgleichungen und die finite Enthalpiegleichung werden dadurch gebildet, daß man in Gleichung (6.66) bzw. (6.67) die Differentialoperatoren durch die entsprechenden Differenzenoperatoren (6.40) - (6.44) und (6.52) ersetzt und nach Stützstellen in η-Richtung ordnet.
Die finite Elementenerhaltungsgleichung lautet:

$$\tilde{Y}_{k_{m,n-1}} \left[D_{fi}\Lambda_{I\eta\eta,n} + \frac{\bar{v}_{m,n} + D_{fi}}{\eta_n}\Lambda_{I\eta,n}\right] +$$

$$\tilde{Y}_{k_{m,n}} \left[D_{fi}\Lambda_{II\eta\eta,n} + \frac{\bar{v}_{m,n} + D_{fi}}{\eta_n}\Lambda_{II\eta,n} - \xi_m \bar{u}_{m,n}\Lambda_{III\xi,m}\right] +$$

$$\tilde{Y}_{k_{m,n+1}} \left[D_{fi}\Lambda_{III\eta\eta,n} + \frac{\bar{v}_{m,n} + D_{fi}}{\eta_n}\Lambda_{III\eta,n}\right]$$

$$= \frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[\frac{C\eta}{Pr}\sum_{i=1}^{n_K}\frac{a_{ik}\tilde{M}_k}{M_i}J_i - \eta D_{fi}\frac{\partial\tilde{Y}_k}{\partial\eta}\right] + \xi_m\bar{u}_{m,n}\left[\Lambda_{I\xi,m}\tilde{Y}_{k_{m-2,n}} + \Lambda_{II\xi,m}\tilde{Y}_{k_{m-1,n}}\right]$$

$$k = 1, n_E \qquad (6.81a)$$

bzw. in Kurzform

$$\tilde{Y}_{k_{m,n-1}} A_{m,n} + \tilde{Y}_{k_{m,n}} B_{m,n} + \tilde{Y}_{k_{m,n+1}} C_{m,n} = D_{m,n}$$

$$k = 1, n_E \qquad (6.81b)$$

Als finite Enthalpiegleichung ergibt sich:

$$h_{m,n-1}\left[\frac{C}{Pr}\Lambda_{I\eta\eta,n} + W_{m,n}\Lambda_{I\eta,n}\right] +$$

$$h_{m,n}\left[\frac{C}{Pr}\Lambda_{II\eta\eta,n} + W_{m,n}\Lambda_{II\eta,n} - \xi_m\bar{u}_{m,n}\Lambda_{III\xi,m}\right] +$$

$$h_{m,n+1}\left[\frac{C}{Pr}\,\Lambda_{III\eta\eta,n} + W_{m,n}\Lambda_{III\eta,n}\right] +$$

$$= \frac{1}{\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left[\frac{C\eta}{Pr}\sum_{i=1}^{n_K} h_i\left(\hat{J}_i + \frac{\partial Y_i}{\partial\eta}\right)\right] + \xi_m\bar{u}_{m,n}\left[h_{m-2,n}\Lambda_{I\xi,m} + h_{m-1,n}\Lambda_{II\xi,n}\right] \qquad (6.82a)$$

und in Kurzform

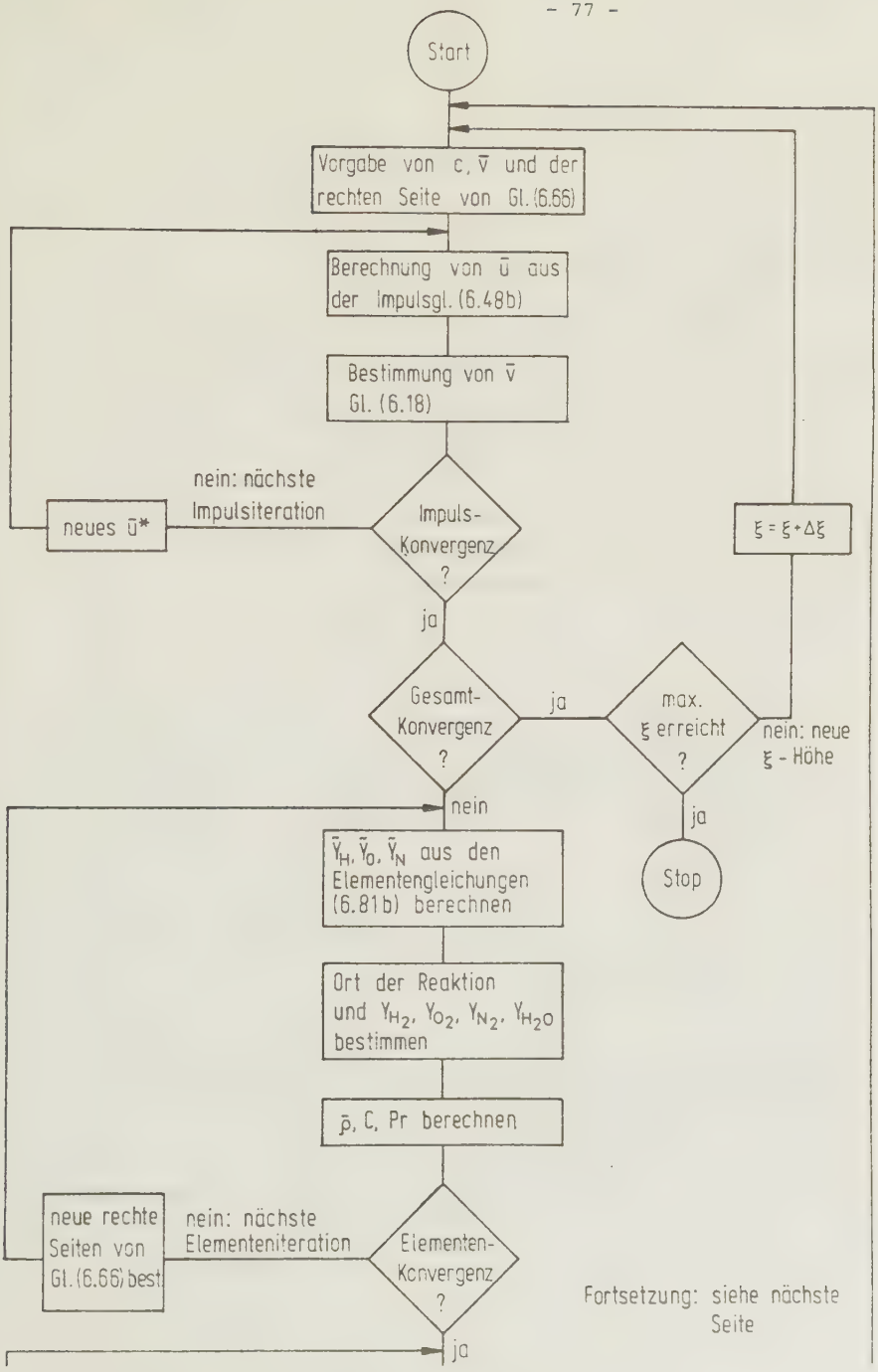
$$h_{m,n-1}\,A_{m,n} + h_{m,n}\,B_{m,n} + h_{m,n+1}\,C_{m,n} = D_{m,n} \qquad (6.82b)$$

Die Lösung der aus den Gleichungen (6.81b) und (6.82b) entstehenden algebraischen Gleichungssysteme erfolgt wie in Abschnitt 6.2.3 beschrieben.

6.3.3 Der Lösungsalgorithmus

Bei der Berechnung des Freistrahls wurden zwei Gruppen von Differentialgleichungen iterativ gelöst: die Impulsgleichung und n_K Komponentenerhaltungsgleichungen. Im Fall der Diffusionsflamme sind es hingegen drei: die Impulsgleichung, n_E Elementenerhaltungsgleichungen und die Enthalpiegleichung. Zu den von den Stoffwerten abhängigen Größen $\bar{\rho}$,C,Gr gesellt sich die Prandtl-Zahl Pr. Alle diese Größen sind nicht mehr nur von der Gemischzusammensetzung abhängig, sondern auch von der Temperatur.
Der Lösungsalgorithmus (Bild 6.4) ist bis zur Gesamtiterationsabfrage mit dem des Freistrahls identisch. Im Anschluß an diese Abfrage werden die Elementenkonzentrationen $\tilde{Y}_H, \tilde{Y}_O, \tilde{Y}_N$ aus den finiten Elementenerhaltungsgleichungen (6.81b) berechnet. Nun werden der Ort der Reaktion und die Komponentenkonzentrationen $Y_{H_2}, Y_{O_2}, Y_{N_2}, Y_{H_2O}$ ermittelt, wodurch eine Bestimmung von $\bar{\sigma}$,C,Pr notwendig wird. Wenn sich keine Elementenkonvergenz einstellt, wird mit der Berechnung der hauptsächlich von der Diffusion bestimmten rechten Seite der Gleichung (6.66) der nächste Iterationsdurchlauf gestartet.

Nach erfolgter Elementenkonvergenz wird h aus der finiten Enthalpiegleichung (6.82b) berechnet. Die daraus resultierende neue Temperaturverteilung verlangt eine erneute Bestimmung der Größen $\bar{\rho}$,C,Pr,$\frac{\partial C}{\partial \eta}$. Bei der Iteration der Enthalpiegleichung wird der auf der rechten Seite von Gleichung (6.67) auftretende Diffusionstromvektor $\hat{J}_i$ wegen der geringen Abhängigkeit von der Temperatur nicht erneut berechnet. Nach erfolgter Enthalpiekonvergenz wird die nächste Gesamtiteration begonnen. Gesamtkonvergenz ist wiederum dann gegeben, wenn $\bar{u}$ im Rahmen der Geamtiteration konvergent ist.


Start
Vorgabe von c, $\bar{v}$ und der rechten Seite von Gl. (6.66)
Berechnung von $\bar{u}$ aus der Impulsgl. (6.48b)
Bestimmung von $\bar{v}$ Gl. (6.18)
Impuls-Konvergenz ?
nein: nächste Impulsiteration
neues $\bar{u}^*$
ja
Gesamt-Konvergenz ?
ja
max. ξ erreicht ?
nein: neue ξ - Höhe
$\xi = \xi + \Delta\xi$
ja
Stop
nein
$\bar{Y}_H, \bar{Y}_O, \bar{Y}_N$ aus den Elementengleichungen (6.81b) berechnen
Ort der Reaktion und $Y_{H_2}, Y_{O_2}, Y_{N_2}, Y_{H_2O}$ bestimmen
$\bar{\rho}$, C, Pr berechnen
Elementen-Konvergenz ?
nein: nächste Elementeniteration
neue rechte Seiten von Gl. (6.66) best
ja
Fortsetzung: siehe nächste Seite

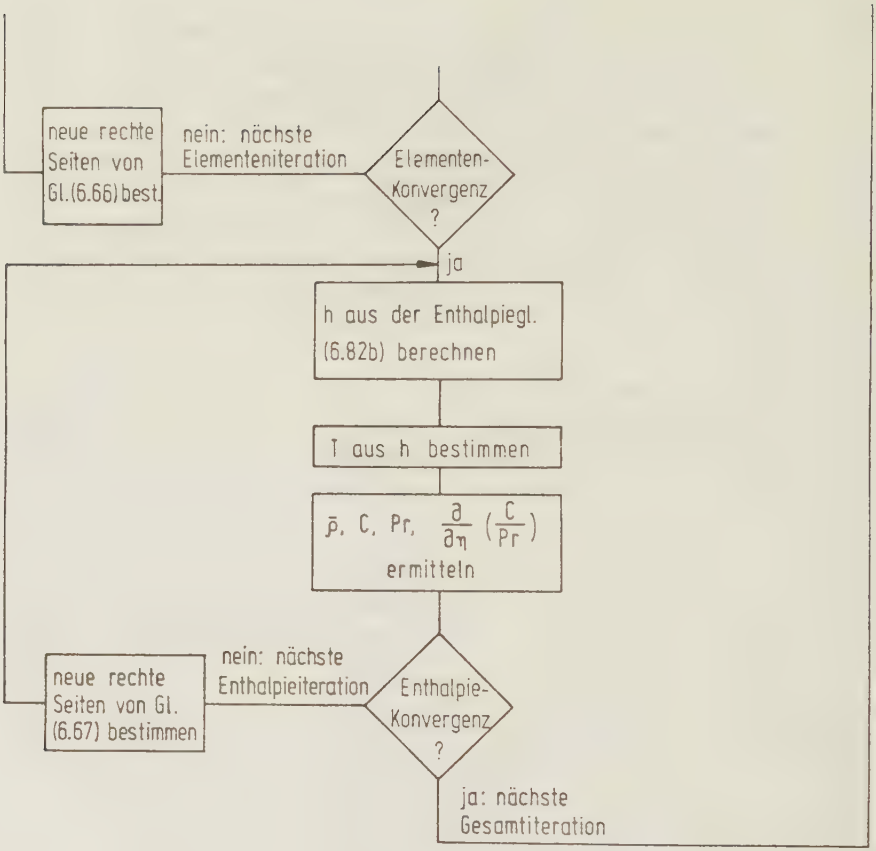


Bild 6.4: Algorithmus der H_2 - Luft - Diffusionsflamme

7. Experimentelle Untersuchungen

7.1 Versuchsaufbau

Die H_2-Luft Diffusionsflamme und der Mehrkomponenten-Freistrahl wurden im Experiment mit einem Brenner erzeugt, der am Lehrstuhl für Technische Thermodynamik der RWTH-Aachen entwickelt worden ist [28] und lediglich leicht modifiziert werden mußte. Der Brenner (Bild 7.1 und 7.2) besteht aus einem Brennerrohr und einer dazu konzentrisch angeordneten Düse, aus der die zu Stabilisierung der Flamme notwendigen Luftströmung austritt. Es wurden Brennerrohre von 10 mm und 18 mm Innendurchmesser verwendet, der Durchmesser der Luftdüse beträgt 57 mm. Die am unteren Ende des Brenners seitlich eintretende Luft passiert erst mehrere Beruhigungssiebe, bevor sie die divergente Beruhigungsstrecke durchläuft. Oberhalb dieser Strecke schließt sich ein Gleichrichterteil an, der aus einem Aluminiumeinsatz mit kleinen Rechteckkanälen besteht. Die konvergente Düse erzeugt schließlich einen achsenparallelen Außenstrom mit dünnen Wandgrenzschichten, der das in Bild 2.1 gezeigte Geschwindigkeitsprofil mit großem ebenen Mittelteil aufweist.

Die Reynolds-Zahl des Wasserstoff im Brennerrohr bewegte sich in den verschiedenen Experimenten zwischen 16 und 1o6, die Außenströmung der Luft ergab im Austrittsquerschnitt der Düse einen Wert von 17OO, so daß beide Strömungen im laminaren Bereich lagen. Oberhalb der Austrittsebene wurde die Laminarität der Flamme bzw. des Freistrahls mit einem Scher-Interferometer mit Wollaston Prisma kontrolliert [36], [37]. Dieser Interferometertyp eignet sich hervorragend zur Überprüfung der Stabilität einer Strömung mit variabler Dichte, da er wie auch das Schlierenverfahren, eine Änderung im Gradienten des Brechungsindex anzeigt und deshalb sehr empfindlich ist. Der Aufbau

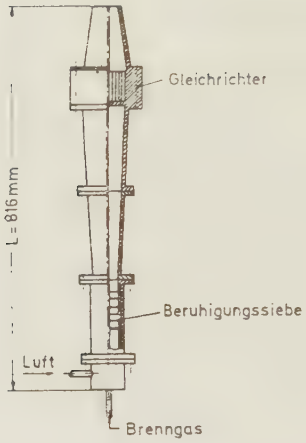


Bild 7.1 Der Umluftbrenner für laminare Diffusionsflammen

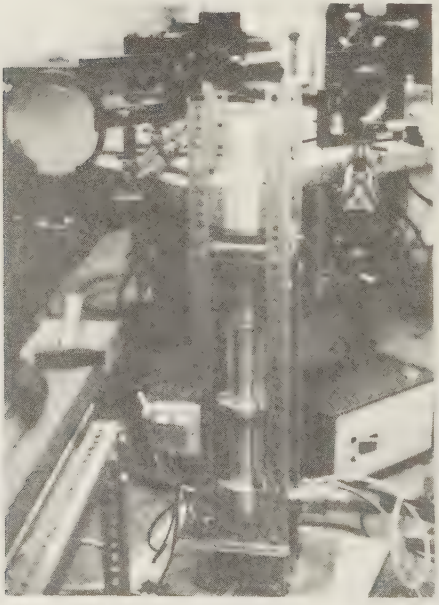


Bild 7.2 Der Brenner vor dem Mach-Zehnder-Interferometer

Bild 7.3 Fotografie der H_2-Luft Diffusionsflamme

des Interferometers ist einfach und bedarf keiner aufwendigen Justierarbeit.

Die Versorgung des Brenners mit Wasserstoff und Luft erfolgte aus Gasflaschen. Die Dosierung des Wasserstoffs geschah über ein Feinregulierventil. Die Gasströme wurden mit herkömmlichen Schwebekörpermeßgeräten gemessen. Diese Werte dienten jedoch nur zur Grundeinstellung der Volumenströme, die Feinabstimmung erfolgte durch Geschwindigkeitsmessungen mit dem Laser-Doppler-Anemometer (siehe Abschnitt 8.2). Die Abgase wurden von einer Absaugvorrichtung ins Freie befördert.

Eine direkt vor dem unteren Ende des Brennerrohres angebrachte Flammensperre aus Sintermetall sollte ein mögliches Zurückschlagen der Flamme in die Gaszufuhrleitung verhindern. Als weitere Sicherheitseinrichtung wurde die H_2-Konzentration im Labor durch ein Gaswarngerät überwacht, das bei Überschreitung von 20% der unteren Explosionsgrenze akustischen Alarm geben, über ein elektromagnetische Zweiwegeventil die H_2-Zufuhr unterbrechen und die Spülung der Anlage mit N_2 auslösen konnte.

In Bild 7.3 ist eine Fotografie der H_2-Luft Diffusionsflamme gezeigt, deren normalerweise schwaches Eigenleuchten durch zugesetzte T_iO_2-Teilchen verstärkt wurde. Auf dem Bild sind die Kreuzstrahlen des Laser-Doppler-Anemometers zu sehen.

7.2 Interferometrische Messung des Brechungsindex

7.2.1 Das Mach-Zehnder Interferometer

Die Interferogramme der H_2-Luft Diffusionsflamme wurden mit einem Mach-Zehnder-Interferometer angefertigt. Dieses Instrument ist ein klassisches Referenzstrahl-Interferometer, bei dem der phasenverschobene Objektstrahl mit dem ungestörten Referenzstrahl zur Interferenz gebracht wird. Eine prinzipielle Beschreibung des Mach-Zehnder-Interferometers kann der umfang-

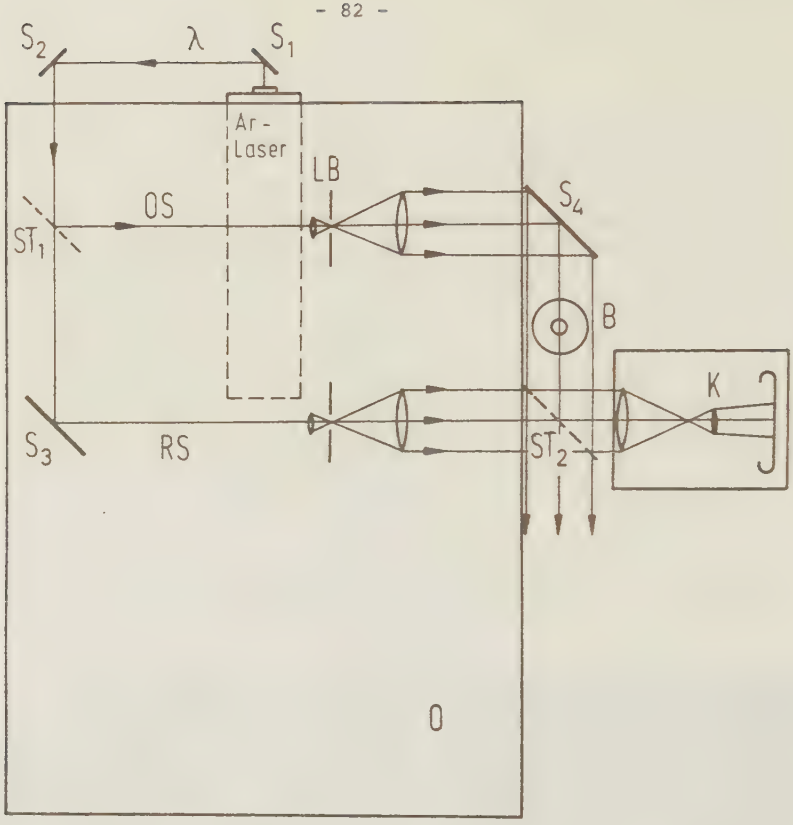


Bild 7.4 Optischer Aufbau des

B	Brenner
K	Kamera
LB	Lochblende
O	Optische Platte
OS	Objektstrahl
RS	Referenzstrahl
S	Spiegel
ST	Strahlteiler
λ	Lichtwellenlänge (514,5 nm)

reichen Literatur entnommen werden [38], [39], [40], [41]. Das verwendete Mach-Zehnder Interferometer ist auf einer 220 kg schweren Granitplatte mit den Abmessungen 1 m x 1,5 m aufgebaut, die über pneumatische Rollbälge und über Kugelschalenlager extrem weich gelagert ist, um Gebäudeschwingungen von der Platte abzukoppeln. Die Prinzipskizze ist in Bild 7.4 dargestellt. An der Plattenunterseite befindet sich eine Halterung für einen 5 W Ar-Laser, dessen Lichtstrahl über zwei Spiegel auf die Plattenoberseite geführt wird. Der Lichtstrahl (λ=514,14 nm) wird am 1. Strahlteiler ST_1 in Referenz- und Objektstrahl aufgeteilt. Der Referenzstrahl wird durch den Planspiegel S_4 parallel zum Objektstrahl umgelenkt. Beide Strahlen werden mit Hilfe von Aufweiterungsoptiken divergent aufgeweitet und anschließend durch akromatische Bikonvexlinsen parallel gemacht. Der aufgeweitete Objektstrahl wird am Spiegel S umgelenkt, der an einem Ausleger befestigt über den Rand der Platte hinausragt. Anschließend durchläuft er die Flamme, bevor er am 2. Strahlteiler ST_2, der sich ebenfalls außerhalb des Plattenrandes befindet, mit dem aufgeweiteten Referenzstrahl zur Interferenz gebracht wird. Die interferierenden Strahlen werden von einer Abbildungsoptik auf einem separaten Tisch direkt auf die Filmebene einer Kamera abgebildet. Die Abbildungsoptik wird auf die Symmetrieachse der Flamme scharf gestellt. Bei der Auswertung der Interferogramme wird angenommen, daß die durch Strahlablenkung hervorgerufenen Fehler vernachlässigt werden können.

7.2.2 Auswertung des Interferogramms eines rotationssymmetrischen Dichtefeldes

Der optische Weg l ist das Integral des Brechungsindex n über den geometrischen Weg s eines Lichtstrahls

$$l = \int_{s_1}^{s_2} n \, ds \qquad (7.1)$$

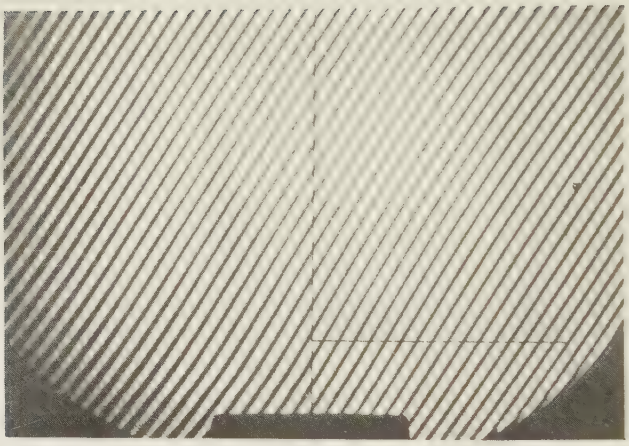


Bild 7.5 Grundstreifenmuster

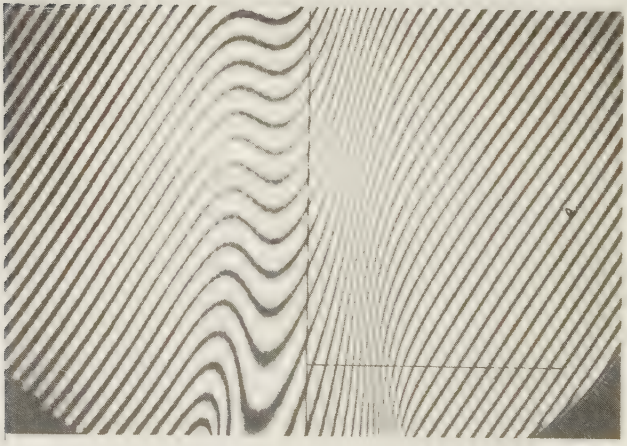


Bild 7.6 Interferogramm der H_2-Flamme [illegible]

Haben alle Strahlen, die am Strahlteiler ST_2 des Mach-Zehnder-Interferometers zusammengeführt werden, den gleichen optischen Weg zurückgelegt, dann ergibt sich keine Phasendifferenz und auf der Abbildungsebene werden keine Interferenzstreifen sichtbar. Diese Einstellung des Interferometers, die man auch mit "unendlicher Streifenbreite" bezeichnet, stellt sich gemäß Gleichung (7.1) ein, wenn bei Abwesenheit eines zu untersuchenden Dichteobjektes, d.h. bei gleichem n im gesamten Interferometer, die zurückgelegten geometrischen Lichtwege gleich sind.

Verdreht man nun z.B. den Spiegel S_4 um einen kleinen Winkel ε um eine der beiden in der Spiegeloberfläche liegenden Achsen, dann werden auf der Abbildungsebene gerade, äquidistante Interferenzstreifen auftreten, die parallel zu der Achse orientiert sind, um die der Spiegel gedreht worden ist. Ursache dieses sogenannten Grundstreifenmusters sind die unterschiedlichen geometrischen Wege der zur Interferenz gebrachten Strahlen. In Bild 7.5 ist das Grundstreifenmuster zu sehen. Unten im Bild erkennt man die Silhouette des Brennerrohres, der dicke senkrechte Strich markiert die Lage der Symmetrieachse. Der schräge Verlauf des Grundstreifenmusters zeigt an, daß der Spiegel S_4 gleichzeitig um beide Achsen gedreht worden ist.

Bringt man die Flamme nun in der Strahlengang des Objektstrahles, dann geht das Grundstreifenmuster infolge des veränderten Brechungsindexfeldes in einen ausgelenkten Zustand, dem eigentlichen Interferogramm, über. Bild 7.6 zeigt das Interferogramm der Flamme, deren Konzentrations- und Temperaturprofile in Abschnitt 8.2.5 dargestellt werden. In Bild 7.7 ist exemplarisch der Verlauf zweier Interferenzstreifen im ausgelenkten Zustand gezeigt. Die gestrichelte Linie zeigt den Verlauf des oberen Streifens im Grundzustand.

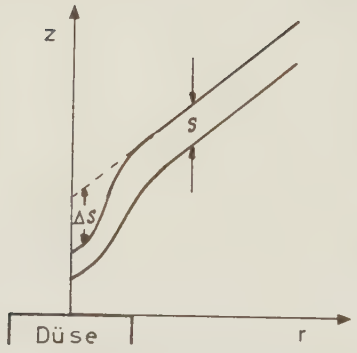


Bild 7.7 Ausgelenkte Interferenzstreifen

Der Abstand der nicht ausgelenkten Streifen wird mit S, die lokale Auslenkung mit ΔS bezeichnet. Die relative Streifenverschiebung $\Delta S/S$ ist mit den optischen Wegen eines einzelnen Referenzstrahls (Index r) und eines Objektstrahls (Index o) wie folgt verknüpft

$$\frac{\Delta S}{S} = \frac{l_o - l_r}{\lambda} \qquad (7.2)$$

bzw. nach l_o aufgelöst

$$l_o = \frac{\Delta S}{S} \cdot \lambda + l_r \qquad (7.3)$$

$\Delta S/S$ in Gleichung (7.3) ist die Meßgröße, die es gestattet, den optischen Weg des Objektstrahls zu ermitteln.

Bei der Bestimmung der $\Delta S/S$-Werte eines Querschnittes der Flamme geht man zweckmäßigerweise folgendermaßen vor: In Bild 7.5 und 7.6 ist in der Höhe, in der die Bestimmung vorgenommen werden soll, jeweils ein horizontaler Strich eingezeichnet, der sich von der Symmetrieachse bis zu einem Punkt erstreckt, in dem kein Unterschied mehr zwischen dem ausgelenkten (Bild 7.6) und nicht ausgelenkten (Bild 7.5) Streifenmuster festzustellen ist. Der Interferenzstreifen, auf dem das rechte Ende des Striches liegt, erhält in Bild 7.5 und 7.6 die Ordnungsnummern O. In beiden Bildern werden nun die Streifen, die sich links davon anschließen, fortlaufend durchnummeriert, bis man die Symmetrieachse überschritten hat. Anschließend trägt man die Ordnungszahl der Streifen über dem Abstand (Radius) zwischen ihrem Schnittpunkt mit der horizontalen Linie und der Symmetrieachse auf. Da die Interferenzstreifen meistens eine gewisse Breite besitzen, muß man den Schnittpunkt der Mitte des Streifens mit der horizontalen Linie berücksichtigen. In Bild 7.8 sind die eingetragenen Punkte bereits durch Kurvenzüge verbunden worden.

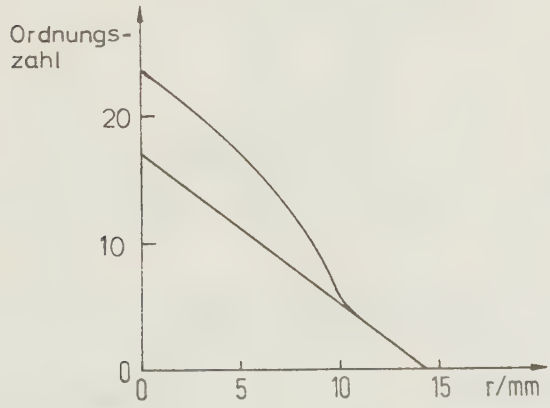


Bild 7.8 Radialer Verlauf der Streifenordnungen des Grundmusters (untere Kurve) und des ausgelenkten Musters

Die Kurve gilt für das Grundmuster aus Bild 7.5. Sie ist nur eine Gerade, wenn die Streifen des Grundmusters äquidistant sind, was von der Qualität der optischen Elemente des Interferometers abhängt. Die obere Kurve gibt den Verlauf der Ordnungszahlen über dem Radius im Interferogramm (Bild 7.6) wieder. Der senkrechte Abstand beider Kurven voneinander, d.h. der Ordnungszahlunterschied zwischen ausgelenktem Zustand und Grundmuster ist gleichbedeutend mit $\Delta S/S$, da eine Auslenkung ΔS von einer Streifenbreite S identisch ist mit einer Ordnungszahländerung von 1. Trägt man den Abstand beider Kurven über dem Radius auf, dann erhält man den gewünschten Verlauf von $\Delta S/S$ (Bild 7.9)

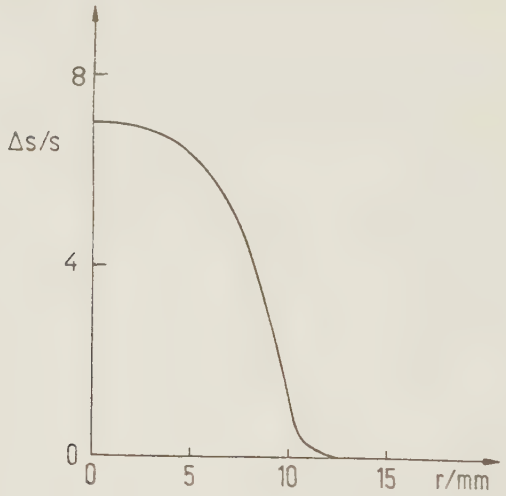


Bild 7.9 Radialer Verlauf der relativen Streifenauslenkung

Zur Ermittlung des (n-1)-Verlaufes aus dem $\Delta S/S$ Profil wird Gleichung (7.1) in Gleichung (7.3) eingeführt.

$$\int_{s_1}^{s_2} (n-1)\, ds = \frac{\Delta S}{S}\lambda + (n-1)_r \int_{s_1}^{s_2} ds \qquad (7.4)$$

Anstelle von n wird in Gleichung (7.4) (n-1) verwendet. Die Auswertung der Integrale in dieser Gleichung geschieht unter Berücksichtigung der Rotationssymmetrie der Flamme, nach einem von Schardin [41] angegebenen Verfahren. In Bild 7.1o ist in der Höhe, in der das ΔS/S Profil vorliegt, ein horizontaler Querschnitt durch die Flamme gelegt worden.

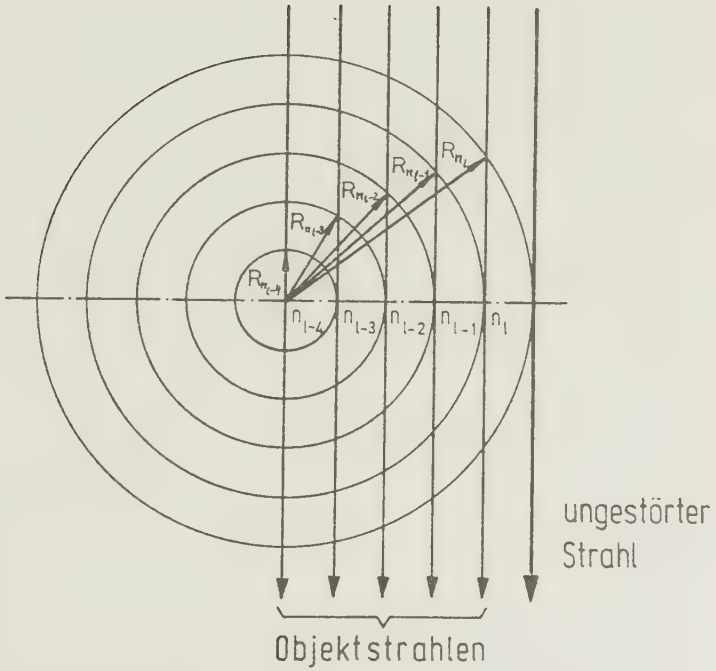


Bild 7.10 Strahlengang durch einen Flammenquerschnitt

Der Kreisquerschnitt wird von n_1 Objektstrahlen und einem ungestörten Strahl, der mit dem Referenzstrahl identisch ist, durchlaufen. Die Objektstrahlen sind an den Stellen eingezeichnet worden, an denen Gleichung (7.4) für diskrete $\Delta S/S$-Werte ausgewertet werden soll. Der Querschnitt ist in n_1 konzentrische Kreisringe aufgeteilt, die abhängig von der Lage der Objektstrahlen nicht notwendigerweise äquidistant angeordnet sind. Es wird angenommen, daß der Brechungsindex innerhalb eines Kreisringes konstant ist. Der größte Radius R_{n_1} entspricht dem horizontalen Strich im Interferogramm (Bild 7.6) und grenzt das Dichtefeld der Flamme von der Umgebung ab. Der Referenzstrahl, der in der experimentellen Anordnung einen anderen Weg nimmt als die Objektstrahlen, wurde der einfacheren Darstellung wegen parallel zu ihnen gezeichnet. Die Integrationsgrenzen s_1 und s_2 in Gleichung (7.4) stecken den geometrischen Weg des Objekt- und Referenzstrahles ab, auf dem sich ein Unterschied der optischen Wege beider Strahlen einstellt, d.h. der geometrische Weg entspricht der Strecke, die ein Objektstrahl in der Flamme zurücklegt. Unter der schon gemachten Prämisse konstanter Brechungsindizes innerhalb der Kreisringe läßt sich das Integral auf der linken Seite von Gleichung (7.4) durch eine Summe ersetzen. Für den äußersten Objektstrahl n_1 läßt sich schreiben

$$(n-1)_{n_1} 2(R_{n_1}^2 - R_{n_{1-1}}^2)^{1/2} = (\frac{\Delta S}{S})_{n_1} \lambda + (n-1)_r 2(R_{n_1}^2 - R_{n_{1-1}}^2)^{1/2} \tag{7.5}$$

bzw. nach der Unbekannten $(n-1)_{n_1}$ aufgelöst

$$(n-1)_{n_1} = \frac{1/2(\frac{\Delta S}{S})_{n_1} \lambda + (n-1)_r (R_{n_1}^2 - R_{n_{1-1}}^2)^{1/2}}{(R_{n_1}^2 - R_{n_{1-1}}^2)^{1/2}} \tag{7.6}$$

Damit ist(n-1)im äußersten Kreisring bestimmt. Die(n-1)-Werte der anderen Kreisringe können nun sukzessiv von außen nach innen laufend ermittelt werden. Gleichung (7.4) ergibt für den j-ten Objektstrahl angeschrieben und nach $(n-1)_j$ aufgelöst

$$(n-1)_j = \frac{1/2\left(\frac{\Delta S}{S}\right)_j \lambda + (n-1)_r \left(R_{n_1}^2 - R_j^2\right)^{1/2} - \sum_{m=1}^{j+1} (n-1)_m \left(R_m^2 - R_{m-1}^2\right)^{1/2}}{\left(R_j^2 - R_{j-1}^2\right)^{1/2}} \qquad (7.7)$$

$$j = n_{l-1}, 1$$

Die Genauigkeit eines mit den Gleichungen (7.6) und (7.7) berechneten n-1 Profils hängt maßgeblich von der Zahl der Kreisringe, d.h. von der Zahl der ΔS/S-Werte, die zur Auswertung zur Verfügung stehen, ab. Die gewünschte große Zahl von ΔS/S-Werten läßt sich durch eine große Interferenzstreifenzahl des Grundmusters und dementsprechend vielen Schnittpunkten der ausgelenkten Streifen mit der horizontalen Linie (Bild 7.6) erreichen. Zwar läßt sich die Zahl der Grundstreifen durch Vergrößerung der Drehwinkel des Strahlteilers ST_2 beliebig erhöhen, gleichzeitig sinkt damit aber auch die absolute Empfindlichkeit, d.h. die absolute Streifenauslenkung des Interferogramms. Dieses hat zur Folge, daß sich die Meßunsicherheit bei der Bestimmung der eng nebeneinanderliegenden Schnittpunkte der Streifen mit der horizontalen Linie erhöht, wenn die Zahl der Streifen sehr groß ist. Die Streifenzahl der für die Auswertung verwendeten Interferogramme war mehr als doppelt so groß wie die der Bilder 7.5 und 7.6, die zum Zweck einer guten Erkennbarkeit der Einzelstreifen geringer gehalten wurde.

Die aus dem Interferogramm der H_2-Luft Diffusionsflamme ermittelten (n-1)-Profile sind für zwei verschiedene Höhen (z^*_{F1} = 0,19 und z^*_{F1} = 0,46) in Bild 8.47 und 8.50 gezeigt. Die Kurven in diesen Bildern sind aus den einzelnen Meßpunkten durch Interpolation mit einer ausgleichenden Spline-Funktion hervorgegangen.

7.3 Geschwindigkeitsmessungen mit dem Laser-Doppler-Anemometer

Sowohl im Freistrahl wie auch in der Flamme wurden Geschwindigkeitsmessungen mit dem Laser-Doppler-Anemometer (LDA) gemacht. Auf eine prinzipielle Beschreibung dieser inzwischen weit verbreiteten Meßtechnik wird an dieser Stelle verzichtet und auf die umfangreiche Literatur [42], [43], [44] verwiesen.

Die Meßeinrichtung bestand aus einem LDA-System der Fa. TSI mit dem Counter-Modell 198oA und zugehöriger Optik. Als Lichtquelle diente ein 25mW Helium-Neon-Laser, der, wie auch die Strahlteileroptik und der Photomultiplier, an einem schrittmotorisch kontrollierten x-y Verschiebetisch befestigt waren. Das Meßvolumen des Systems, das nach dem Dual-Beam- oder Zweistrahlverfahren funktionierte, konnte mit einer Genauigkeit von 10^{-2}mm in der Flamme verfahren werden. Das digitale Ausgangssignal des Counters wurde von einem PDP 11/03 Rechner verarbeitet. Das Auswertungsprogramm berechnete die mittlere Geschwindigkeit und den Turbulenzgrad. Außerdem konnte die Häufigkeitsverteilung der Einzelmessungen graphisch dargestellt werden. Anhand der Häufigkeitsverteilung konnten Messungen, die bei einer unbemerkt flackernden und somit nicht stationären Flamme gemacht worden waren, ausgesondert werden.

Sowohl dem aus dem Brennerrohr strömenden Wasserstoff wie auch der Außenluftströmung wurden AlO_2-Teilchen zugesetzt. Dies geschah im Fall der Außenströmung zufriedenstellend mit einem zylindrischen Wirbelbettgenerator [45], [46]. Der Volumenstrom von 1,0 l/s reichte aus, um genügend Teilchen aufzuwirbeln. Dem Teilchengenerator war ein Zyklon nachgeschaltet, der große Teilchen aus dem Gas-

strom nahm.

Obwohl der Wirbelgenerator für den Wasserstoffstrom nur einen Durchmesser von 18 mm besaß, wurden nur ab einem Volumenstrom von 0,015 l/s genügend Teilchen produziert, um in der gesamten Flamme Messungen durchzuführen. Dadurch waren Geschwindigkeitsmessungen in Flammen, die mit dem kleineren Brennerrohr (Ø 10 mm) erzeugt wurden, nicht möglich, da sie bei dem oben genannten Volumenstrom schon Neigung zur Turbulenz zeigten. Versuche mit Teilchengeneratoren, die nach einem anderen Prinzip funktionieren, brachten keine Verbesserung. So wurde der am Aachener Institut für Technische Thermodynamik entwickelte Funkengenerator [47], [48] ausprobiert, bei dem das Teilchenmaterial auf einem ebenen Anodenblech liegt, über dem eine stabförmige Kathode rotiert. Durch die mit regelbarer Frequenz zwischen Kathode und Anode auftretenden Funken wird Teilchenmaterial lokal aufgewirbelt und von dem vorbeistreichenden Gasstrom mitgenommen. Leider konnten die 15000 V des benutzten Gerätes den hohen Durchschlagswiderstand von H_2 nicht überwinden. Ein Gerät mit höherer Spannung hätte vermutlich bessere Ergebnisse gezeigt. Der Solid-Particle-Seeder der Fa. OEI wurde ebenfalls getestet. Bei diesem Generatortyp wird das in einem zylindrischen Rohr befindliche Teilchenmaterial von einem Kolben gegen eine rotierende Bürste gedrückt, die das Material abstreift und es nach einer Drehung von 180° in den Gasstrom bringt, der die Teilchen von der Bürste abnimmt. Letzteres konnte mit der geringen Geschwindigkeit des kleinen H_2-Volumenstroms nicht ausreichend bewerkstelligt werden, weshalb das Gerät verstopfte. Eine weitere Schwierigkeit bei den Messungen in der Flamme ergab sich durch das Auftreten einer teilchenlosen Zone. Diese Beobachtung hat auch Röntgen [28] schon gemacht. Wenn man die Flamme mit TiO_2-Teilchen impft, die bei den herrschenden Temperaturen ein starkes Eigenleuchten aufweisen, kann man beobachten, daß die teilchenlose Zone von den Stromlinien begrenzt wird, die von wandnahen Grenzschichtbereichen außerhalb wie inner-

halb des Brennerrohres ausgehen. Die teilchenlose Zone folgt somit in etwa der mit Pfeilen markierten Stromlinie in dem Stromlinienbild 8.22, auf das in anderem Zusammenhang später nach eingegangen wird. In den gemessenen Geschwindigkeitsprofilen (siehe Bild 8.9 und 8.10) ist die Position der teilchenlosen Zone durch die ausgelassenen Meßpunktkreuze zu erkennen. Für das Phänomen der teilchenlosen Zone bietet sich eine einfache Erklärung an. Die Teilchenstromdichte, d.h. die pro Zeit und Fläche austretenden Teilchen, ist in den wandnahen Bereichen der Grenzschichten am Brennerrohr infolge des Verdrängungseffektes geringer als in der Kernströmung. In der freien Scherschicht direkt oberhalb der Brenneraustrittsebene, die von den wandnahen Bereichen der Grenzschichten gespeist wird, setzt die erste Reaktion und damit eine im Verhältnis zur Umgebungsluft bis zu 10-fache Volumendehnung ein. Dieser Effekt verringert die Teilchenstromdichte noch erheblich mehr und führt zu der Erscheinung der teilchenlosen Zone, die, den Stromlinien dieses Bereiches folgend, ihren Weg durch die Flamme fortsetzt.

8. Ergebnisse und Diskussion

8.1 Untersuchung des Ähnlichkeitsverhaltens der numerischen Lösung

Die in Kapitel 2. angegeben Grenzschichtgleichungen werden üblicherweise nicht, wie dort geschehen, in dimensionsbehafteter Form, sondern in dimensionsloser Schreibweise angegeben. Dazu werden alle dimensionsbehafteten Größen durch geeignete Bezugsgrößen dimensionslos gemacht. In den dimensionslosen Gleichungen treten verschiedene Kennzahlen auf, die zusammen mit den Anfangs- und Randbedingungen die Lösung bestimmen. Die Abhängigkeit von einer dieser Kennzahlen, der Reynolds-Zahl, kann durch die bekannte Grenzschichttransformation eliminiert werden (vgl. [29], S.151).

Man spricht von ähnlichen Lösungen, wenn die Lösungen des transformierten Gleichungssystems für all die Anfangs- und Randbedingungen, die nur einen einzigen Satz von Kennzahlen hervorbringen, gleich sind. Eine ähnliche Lösung scheint für die laminare Diffusionsflamme nicht zu existieren, es ist aber möglich ein dimensionsloses Variablensystem zu finden, in dem die Lösungen verschiedener Anfangsbedingungen sich nur noch wenig unterscheiden. Im Folgenden werden nun die dazu notwendigen Bezugsgrößen, dimensionslosen Variablen und Kennzahlen hergeleitet.

Die meisten gewählten Bezugsgrößen entstammen den Anfangsbedingungen auf der Symmetrieachse in der Austrittsebene (Index o) der Flamme. Die Bezugsstoffgrößen entsprechen den Werten reinen Wasserstoffs, der an dieser Stelle als einzige Komponente auftritt. Damit ergeben sich zunächst die folgenden dimensionslosen Größen:

$$u^* = \frac{u}{u_o}$$

$$v^* = \frac{v}{u_o}$$

$$\rho^* = \frac{\rho}{\rho_o}$$

$$\mu^* = \frac{\mu}{\mu_o} \qquad (8.1)$$

$$h^* = \frac{h}{c_{po} T_o}$$

$$T^* = \frac{T}{T_o}$$

Erhöhte Aufmerksamkeit muß der Wahl der Bezugslänge gewidmet werden, die eine charakteristische Länge des Strömungsproblems sein sollte. Bei umströmten Körpern ergibt sich die Bezugslänge meistens direkt aus den Randbedingungen, so ist z.B. bei einer Zylinderumströmung der Durchmesser die geeignete Länge (vgl.[29]). Anders ist die Situation hingegen bei Strömungen ohne feste Wände, in denen es häufig keine physikalische charakteristische Länge gibt. In diesen Fällen werden abgeleitete Längen gewählt. Die geeignete Bezugslänge des homogenen Freistrahls mit Auftrieb (Forced Plume) wird z.B. aus der Quellstärke des Auftriebs und dem Anfangsimpuls gebildet [49].

Die Ergebnisse der in Kapitel 6. beschriebenen numerischen Flammenberechnung legten die Vermutung nahe, daß die Flammenlänge L als abgeleitete charakteristische Bezugslänge verwendet werden kann. Damit erhält man als dimensionslose Koordinaten:

$$r^* = \frac{r}{L} \qquad (8.2)$$

$$z^* = \frac{z}{L} \qquad (8.3)$$

Führt man zusätzlich noch die Grenzschichttransformation

$$\hat{r} = r^* \sqrt{Re} \tag{8.4}$$

$$\hat{v} = v^* \sqrt{Re} \tag{8.5}$$

durch, dann ergeben sich die Grenzschichtgleichungen (2.1) - (2.6) in folgender dimensionsloser Form

Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial}{\partial z^*}(\rho^* u^* \hat{r}) + \frac{\partial}{\partial \hat{r}}(\rho^* \hat{v} \hat{r}) = 0 \tag{8.6}$$

Impulsgleichung

$$\rho^* u^* \hat{r} \frac{\partial u^*}{\partial z^*} + \rho^* \hat{v} \hat{r} \frac{\partial u^*}{\partial \hat{r}} = \frac{\partial}{\partial \hat{r}}(\hat{r} \mu^* \frac{\partial u^*}{\partial \hat{r}}) + \frac{1}{Fr}(\rho_\infty^* - \rho^*) \tag{8.7}$$

Energiegleichung in Enthalpieform

$$\rho^* u^* \hat{r} \frac{\partial h^*}{\partial z^*} + \rho^* \hat{v} \hat{r} \frac{\partial h^*}{\partial \hat{r}} = - \frac{\partial}{\partial \hat{r}}(\hat{r} \frac{\mu^*}{Pr} \hat{J}_q) \tag{8.8}$$

mit dem Enthalpiestromvektor

$$\hat{J}_q = - \frac{\partial h^*}{\partial \hat{r}} + \sum_{i=1}^{n_K} h_i^* (\hat{J}_i + \frac{\partial Y_i}{\partial \hat{r}}) \tag{8.9}$$

n_E Elementenerhaltungsgleichungen

$$\rho^* u^* \hat{r} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial z^*} + \rho^* \hat{v} \hat{r} \frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \hat{r}} = - \frac{\partial}{\partial \hat{r}}(\hat{r} \frac{\mu^*}{Pr} \sum_{i=1}^{n_K} \frac{a_{ik} \tilde{M}_k}{M_i} \hat{J}_i) \tag{8.10}$$

$$k = 1, n_E$$

mit dem Diffusionsstromvektor

$$\hat{J}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j\neq i}}^{n_K} \frac{M_i}{\bar{M}^2} Le_{ij} \frac{\partial}{\partial \hat{r}}(\bar{M} Y_j) - \frac{Le_i}{T^*} \frac{\partial T^*}{\partial \hat{r}} \qquad (8.11)$$

Die in den Gleichungen und transformierten Variablen auftretenden Kennzahlen haben die Definitionen

$$Re = \frac{u_o L}{\nu_o} \qquad (8.12)$$

$$Fr = \frac{u_o^2}{g L} \qquad (8.13)$$

$$Pr = \frac{\lambda}{\mu c_p} \qquad (8.14)$$

$$Le_{ij} = \frac{\rho D_{ij} c_p}{\lambda} \qquad (8.15)$$

$$Le_i^T = \frac{D_i^T c_p}{\lambda} \qquad (8.16)$$

Die Reynolds-Zahl tritt in den Gleichungen nicht mehr explizit auf, sondern ist nur noch in der Koordinate $\hat{r}$ und in $\hat{v}$ enthalten. Die wichtigste der in den Gleichungen verbliebenen Kennzahlen ist die Froude-Zahl. Die restlichen Kennzahlen, die Prandt-Zahl, die polynäre Lewis-Zahl und die Lewis-Zahl der Thermodiffusion, werden alle von lokalen Stoffgrößen gebildet.

Als Beispiel für das Ähnlichkeitsverhalten sollen nun die Konturen von zwei H_2-Luft Flammen gezeigt werden, deren Anfangsbedingungen unterschiedlich sind, aber annähernd gleiche Froude-Zahlen ergeben. Die Berechnungen der Konturen erfolgte mit dem numerischen Verfahren. Im ersten Fall (Kennzeichnung in den Bildern: I) gelten die Anfangsbedingungen (vgl. Abschnitt 2.1): u_o = 0,35 m/s, r_I = 5 mm, u_A = 0,45 m/s, r_A = 14 mm. Die Rechnung ergibt eine Flammenlänge von L=2,2 cm, was gemäß Gleichung (8.12) Fr = 0,567 bedeutet. Im zweiten Fall (Kennzeichnung: II) gilt u_o = 0,5 m/s,

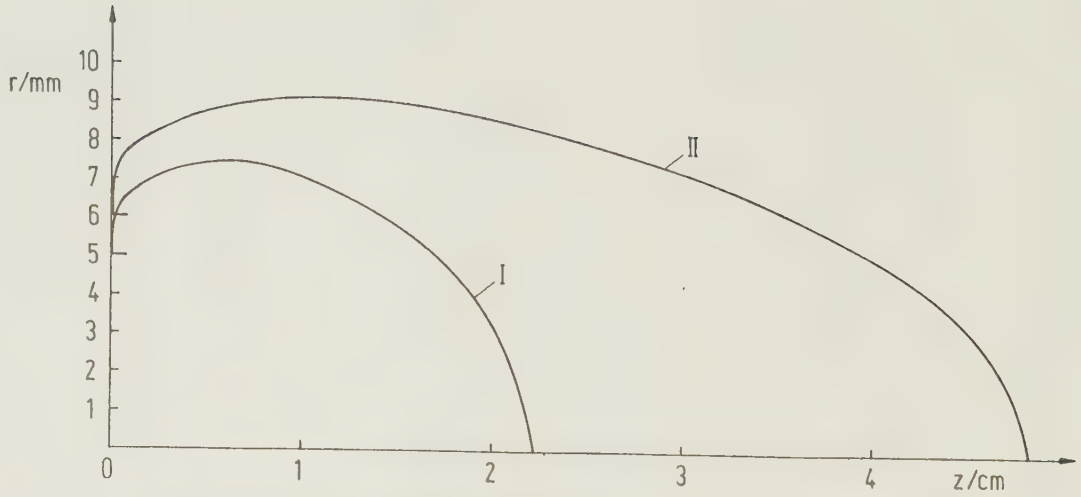


Bild 8.1 Konturen zweier Flammen mit unterschiedlichen Anfangsbedingungen im physikalischen r,z - Koordinatensystem

r_I = 6 mm, u_A = 0,45 m/s, r_A = 15 mm. Mit der berechneten Flammenlänge von L = 4,81 cm erhält man Fr = 0,53. In Bild 8.1 sind beide Konturen in der physikalischen r,z-Ebene dargestellt.

Zeichnet man beide Konturen jedoch in ein $\hat{r}$, z^* Koordinatensystem (Gleichung (8.2) und (8.3)), dann lassen sie sich im Rahmen der Genauigkeit des Differenzenverfahrens, die durch die Schrittweiten bestimmt wird, durch eine einzige Kontur ersetzen, die in Bild 8.2 gezeigt ist. Von geringem Einfluß scheint zu sein, daß in beiden Fällen weder die Geschwindigkeit am Außenrand $u_A^* = \frac{u_A}{u_o}$ gleich ist, noch die Anfangsbedingungen im $\hat{r}$, z^* Koordinatensystem identisch sind. Letzteres, in Bild 8.2 durch die unterschiedliche Lage der Brennerrohrränder bei $\hat{r}$ = 1,85 und $\hat{r}$ = 1,91 gekennzeichnet, ist eine Folge der Abhängigkeit der transformierten $\hat{r}$ Koordinate von der Reynolds-Zahl und der Flammenlänge (vgl. Gleichung (8.4))

Im Folgenden soll nun am Beispiel der Abbildung des Brennerrohrrandes im $\hat{r}$, z^* Koordinatensystem gezeigt werden, daß diese Abhängigkeit gering ist. Dazu ist es notwendig, die Flammenlänge durch Anfangsbedingungen auszudrücken. Aus dem von Hess [50] durch Lösen der Diffusionsgleichung gefundenen Ausdrucks zur Bestimmung der Länge einer Diffusionsflamme

$$L = \frac{\bar{u}_o \, r_I^2}{4 \mathcal{D}_o \, Y_{st} \sqrt{\rho_o / \rho_\infty}} \qquad (8.17)$$

kann man entnehmen, daß die Proportionalität gilt.

$$L \sim \frac{\bar{u}_o \, r_I}{\mathcal{D}_o} \qquad (8.18a)$$

bzw.

$$L \sim \frac{\dot{Q}}{\mathcal{D}_o} \qquad (8.18b)$$

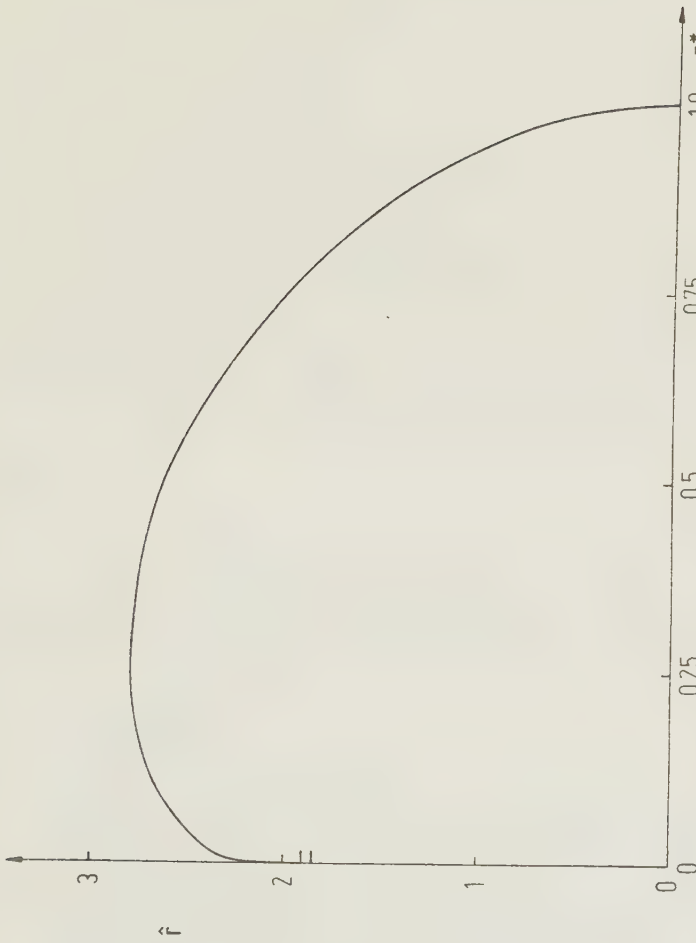


Bild 8.2 Gemeinsame Kontur beider Flammen im Koordinatensystem $\hat{r}, z^*$ gemäß Gleichung (8.3) und (8.4)

Die gleiche funktionale Abhängigkeit entnimmt man der von Spalding [25] angegebenen selbstähnlichen Lösung des Grenzschichtgleichungssystems einer Diffusionsflamme

$$L = \frac{3}{8} \frac{u_o \, r_I^2}{D_o \, f_{st}} \tag{8.19}$$

die unter zahlreichen einschränkenden Annahmen (kein Auftrieb, ρ = konst, μ = konst, D = konst, Le = 1, Sc = 1) hergeleitet werden kann. Kremer hat eine Reihe von experimentell bestimmten Flammenlängen untersucht und festgestellt, daß die Flammenlänge näherungsweise proportional zum Volumenstrom $\dot{Q}$ des Brenngases ist. Dies wird auch von den numerischen Rechnungen bestätigt. Das Verhältnis der Flammenlängen in Bild 8.1 beträgt 2,18, das der Volumenströme 2,06. Gleichung (8.4) läßt sich mit (8.12) umformen zu

$$\hat{r} = r \sqrt{\frac{u_o}{\nu_o \, L}} \tag{8.20}$$

Schließlich erhält man unter Verwendung von Gleichung (8.18a) für die transformierte Koordinate

$$\hat{r} \sim \frac{r}{r_I} \sqrt{\frac{D_o}{\nu_o}} = r^{*'} \sqrt{\frac{\rho_o}{Sc}} \tag{8.21}$$

Aus Gleichung (8.21) folgt, daß die Lage des Brennerrohrrandes im $\hat{r}$, z^* Koordinatensystem, für den $r^{*'} = 1$ gilt, nur noch von der aus Bezugsstoffgrößen gebildeten Schmidt-Zahl und ρ_o abhängt. Dies bedeutet, daß die transformierten Anfangsbedingungen einzig von der Wahl des Brennstoff- und Umgebungsgases der Diffusionsflamme bestimmt werden, wobei

vorausgesetzt wird, daß das Umgebungsgas in Ruhe ist ($u_A = 0$). Obwohl diese Aussage strenggenommen nur unter der Prämisse der Proportionalitätsbeziehung (8.18a) gilt, wird auch das durch Gleichung (8.4) definierte $\hat{f}$ als Folge der Variation der physikalischen Anfangsbedingungen nur einer geringen Änderung unterworfen sein, weil die Proportionalität der Gleichung (8.18a) näherungsweise durch Rechnung und Experimente bestätigt wurde. Dies ist ein Grund für das gute Ähnlichkeitsverhalten der Lösungen. Hinzu kommt, daß die Lösung von parabolischen Differentialgleichungen stärker von den Rand- als von den Anfangsbedingungen bestimmt werden.

Als nächstes soll der Einfluß der Froude-Zahl untersucht werden. Dazu wird die Proportionalitätsbeziehung (8.18a) in die Definition der Froude-Zahl (8.13) eingeführt.

$$Fr \sim \frac{4\bar{u}_o D_o}{g r_I^2} \qquad (8.22)$$

Mit Hilfe von Gleichung (8.22) lassen sich nun die Bedingungen formulieren, unter denen laminare Diffusionsflammen mit unterschiedlichen physikalischen Anfangsbedingungen quasi-ähnlich sind:

- Die Zusammensetzung von Brenngas und Umgebungsgas muß gleich sein.
- Die Froude-Zahl (Gleichung (8.22)) muß konstant bleiben. Dies ist der Fall, wenn das Verhältnis $\bar{u}_o/r_I^2$ gleich ist, bzw. das Verhältnis von mittlerer Ausströmungsgeschwindigkeit $\bar{u}_o$ des Brenngases zur Querschnittfläche des Brennerrohres dasselbe ist.
- Wenn das Umgebungsgas nicht in Ruhe ist, dann sollte der Randwert der dimensionslosen Geschwindigkeit u_A^* annähernd gleich bleiben.

Für die Darstellung der Ergebnisse in den folgenden Abschnitten wird nicht, wie in Bild 8.2 geschehen, die berechnete Flammenlänge als Bezugslänge verwendet, sondern statt dessen die Proportionalitätsbeziehung (8.18a). Dann erhält man für die dimensionslose Koordinate z^*

$$z^* = \frac{z\, D_o}{u_o\, r_I^2} \qquad (8.23)$$

Für die Bestimmung von $\hat{r}$ und Fr gelten entsprechend die Gleichungen (8.21) und (8.22). Die Wahl der durch Gleichung (8.18a) gegebenen Bezugslänge hat den Vorteil, daß sie a priori aus den Anfangsbedingungen bestimmt werden kann, bedeutet aber gleichzeitig einen gewissen Qualitätsverlust des Ähnlichkeitsverhaltens. In Bild 8.3 sind die Flammenkonturen des Bildes 8.1 in der durch Gleichung (8.21) und (8.23) bestimmten $\hat{r}$, z^* Ebene eingezeichnet. Die Ränder beider Brennerrohre werden zwar gemäß Gleichung (8.21) jetzt im selben Punkt auf der $\hat{r}$- Achse abgebildet, die Konturen der Flammen ergeben jedoch, mit Ausnahme der alleruntersten Region, nicht mehr nur einen einzigen Verlauf. Für den in den Gleichungen auftretenden binären Diffusionskoeffizient D_o wurde der Einfachheit halber der Wert $67 \cdot 10^{-6} m^2/s$ gewählt, der das System H_2-N_2 repräsentiert. Dies ist wegen des hohen N_2-Anteils in Luft und des geringen Unterschiedes zwischen M_{O2} und M_{N2} gerechtfertigt (siehe auch Gleichung (3.1o)). ν_o hat den Wert $1o9 \cdot 10^{-6} \frac{m^2}{s}$. Die Ergebnisse des H_2-Luft Freistrahls werden in den gleichen dimensionslosen und transformierten Variablen dargestellt wie die der Flamme Dies ist möglich, weil die durch die Beziehung (8.18a) bzw. (8.18b) gegebene charakteristische Länge L nur eine Funktion des Volumenstroms und der Diffusionseigenschaften ist, aber in keinster Weise mit der chemischen Reaktion verknüpft ist. Die Ergebnisse aus Rechnung und Experiment werden also im $\hat{r}$, z^* Koordinatensystem (Gleichung (8.21) und (8.23)) dargestellt, das auf der aus den Anfangsbedingungen resultierenden Bezugslänge (8.18a) basiert. Um jedoch den Vergleich

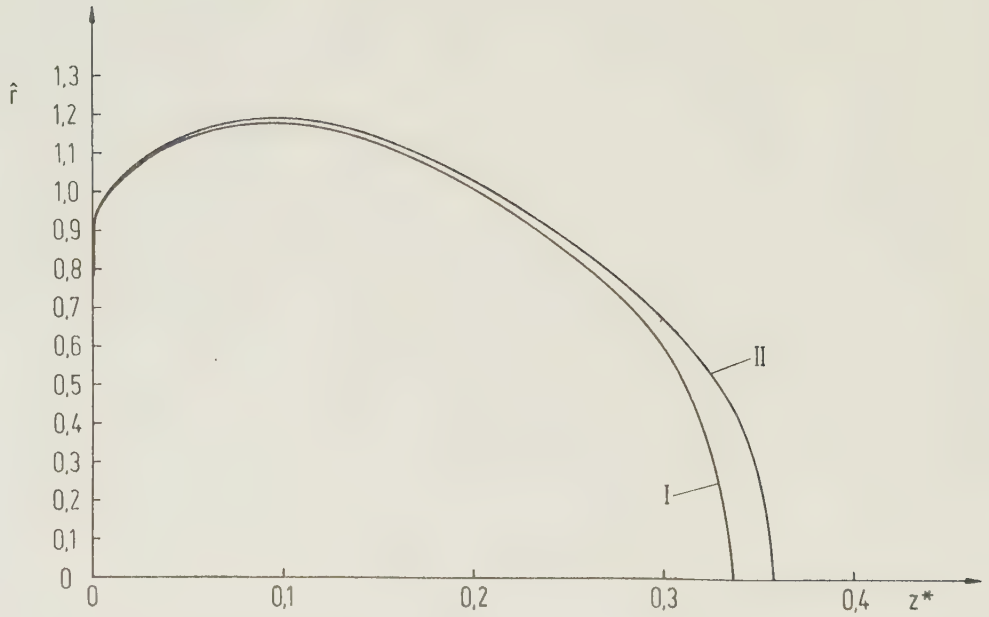


Bild 8.3 Konturen beider Flammen im Koordinatensystem $\hat{r}, z^*$ gemäß Gleichung (8.21) und (8.23)

von Flammen zu ermöglichen, die nach Gleichung (8.18a) gleiche Längen L besitzen, deren berechnete Flammenlängen aber unterschiedlich sind (wie z.B. in 8.3.2 und 8.3.3), wird zusätzlich, in Abschnitt 8.3.1 sogar ausschließlich, die auf die berechnete Flammenlänge L_b bezogene dimensionslose Koordinate

$$z^*_{Fl} = \frac{z}{L_b} \qquad (8.24)$$

angegeben.

8.2 Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Geschwindigkeitsprofilen des H_2-Luft Freistrahls

In diesem Abschnitt wird nur ein Vergleich zwischen gemessenen und berechneten Geschwindigkeitsprofilen des H_2-Luft Freistrahls gezeigt, der hauptsächlich - wie schon in Kapitel 6. erwähnt - dem Zweck dient, die Güte des numerischen Verfahrens zu überprüfen.

Die radialen Geschwindigkeitsprofile von H_2-Luft Freistrahlen wurden für verschiedene axiale Positionen sowohl mit dem in Abschnitt 6.2 beschriebenen Verfahren berechnet, als auch im Experiment mit dem Laser-Doppler-Anemometer gemessen. Erhöhte Aufmerksamkeit muß der Übereinstimmung der Anfangs- und Randbedingungen in Rechnung und Experiment gewidmet werden. Denn es war notwendig, für die Rechnung die maximale Geschwindigkeit u_o des Parabolprofils des Wasserstoffs (siehe Bild 2.1) in der Austrittsebene (z=0) des Freistahls zu kennen, während im Experiment aufgrund der endlichen Abmessungen des LDA-Meßvolumens in dieser Höhe keine Messungen durchgeführt werden konnten und somit keine Kontrolle der Identität von u_o in Rechnung und Experiment möglich war. Eine Abstimmung von u_o über den in der Rechnung vorgegebenen Volumenstrom gelang mit dem verwendeten Schwebekörpermeßgerät nicht ausreichend genau.

Deshalb wurde im Experiment auf der Symmetrieachse die Geschwindigkeit eingestellt, die sich aus der Rechnung für die unterste Höhe (z=1,4 mm) ergab, die mit dem LDA vermessen werden konnte. Infolge des starken Auftriebeffekt weicht die Geschwindigkeit in dieser Höhe vor allem bei kleinen Volumenströmen schon erherblich von u_o ab. Die dimensionslose Geschwindigkeit $u^* = u/u_o$ ist in den Bildern 8.4 bis 8.6 über $\tilde{r}$ (Gleichung (8.21)) aufgetragen. Die gezeigten Profile gelten für einen H_2-Luft Freistrahl mit den Daten r_I = 9 mm, u_o = 1,28 m/s, u_∞ = 0,45 m/s.

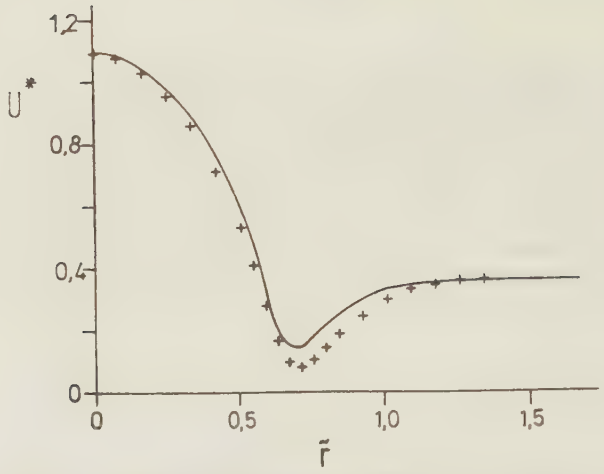


Bild 8.4 Radiales Geschwindigkeitsprofil des Freistrahls in $z^* = 1{,}18 \cdot 10^{-3}$

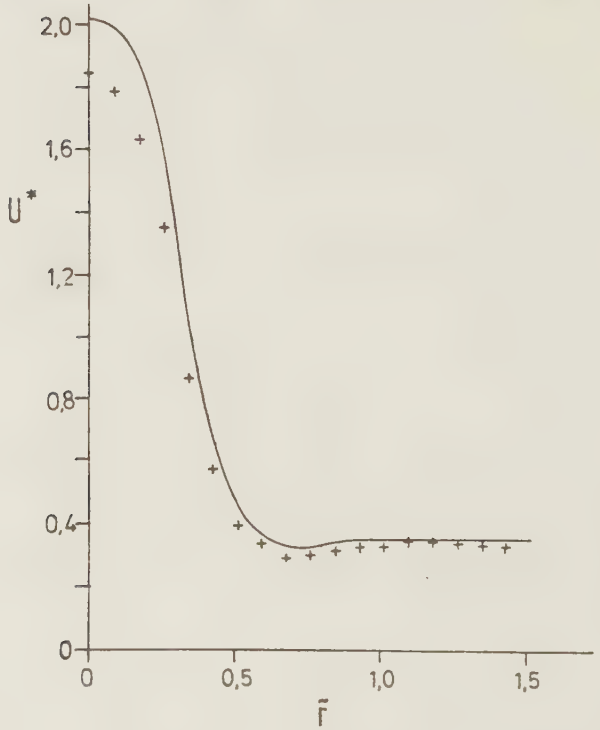


Bild 8.5 Radiales Geschwindigkeitsprofil des Freistrahls in $z^* = 2{,}58 \cdot 10^{-2}$

Die Bezugslänge L (Gleichung (8.18a)) ergibt sich zu 0,773 und die Froude-Zahl (Gleichung (8.22)) zu Fr = 0,216.

Bild 8.4 zeigt das gemessene und berechnete (durchgezogene Kurve) radiale Geschwindigkeitsprofile in der untersten Höhe (z=1,4 mm, $z^* = \frac{z}{L} = 1{,}181 \cdot 10^{-3}$), die vermessen werden konnte. Die Nachlaufdelle hinter der Rohrwand ($\hat{r} = 0{,}784$) fällt im gemessenen Profil kräftiger aus, weil in der Rechnung die Wanddicke nicht berücksichtigt wurde. Entsprechend der zuvor gemachten Ausführungen stimmen die Geschwindigkeiten auf der Symmetrieachse exakt überein.

Die Bilder 8.5 und 8.6 geben die Geschwindigkeitsprofile wieder in z = 2 cm bzw $z^* = \frac{z}{L} = 2{,}58 \cdot 10^{-2}$ und z = 6 cm, bzw $z^* = 7{,}76 \cdot 10^{-2}$. Bemerkenswert ist die durch den starken Auftrieb bedingte Geschwindigkeitszunahme, die in Bild 8.6 die Mittengeschwindigkeit auf den 2,6 fachen Wert von u_o ansteigen läßt. Die Übereinstimmung zwischen den gemessenen und berechneten Profilen ist gut. Dies ist nicht nur ein Beleg dafür, daß die Impulsaustauschvorgänge von dem Berechnungsverfahren richtig erfaßt werden, sondern auch dafür, daß die Konzentrationsprofile richtig berechnet werden. Diese Schlußfolgerung ist zulässig, da der Auftriebseffekt, der die axiale Geschwindigkeitsentwicklung des Freistrahls maßgeblich bestimmt, nur von der örtlichen Dichte und damit von der Gemischzusammensetzung abhängt. In den Bildern 8.7 und 8.8 sind die berechneten Konzentrationsprofile in den beiden unteren Höhen gezeigt. Direkt über der Austrittsebene des Freistrahls hat erst in der Umgebung des Brennerrohrrandes eine Vermischung von H_2- und Luft stattgefunden. Der Kernbereich des Freistrahls besteht noch zu 100% aus H_2. In Bild 8.8 hingegen haben die Bestandteile der Luft, N_2 und O_2, schon die Symmetrieachse erreicht.

Weitere rechnerische und experimentelle Ergebnisse des Mehrkomponenten-Freistrahls sind in [52] enthalten.

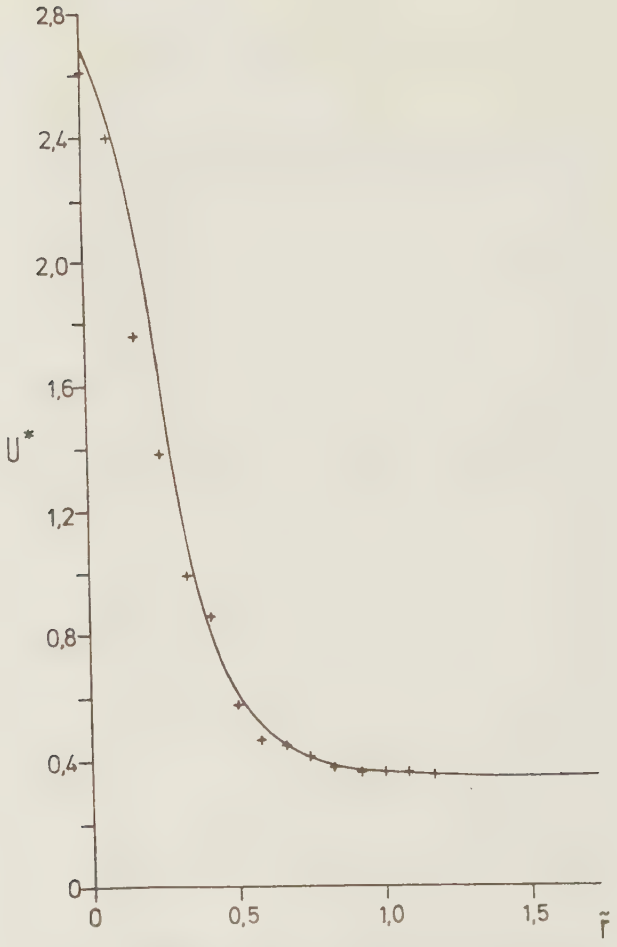


Bild 8.6 Radiales Geschwindigkeitsprofil des Freistrahles in $z^* = 7{,}76\ 10^{-2}$

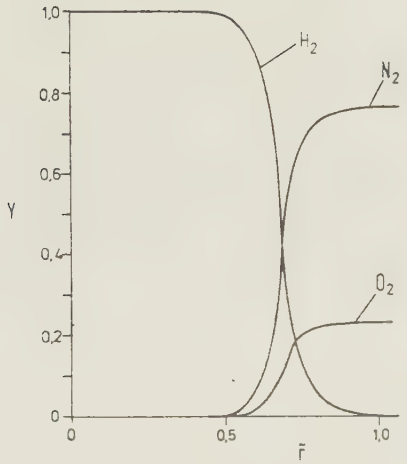


Bild 8.7 Konzentrationen des Freistrahls in $z^* = 1{,}18 \cdot 10^{-3}$

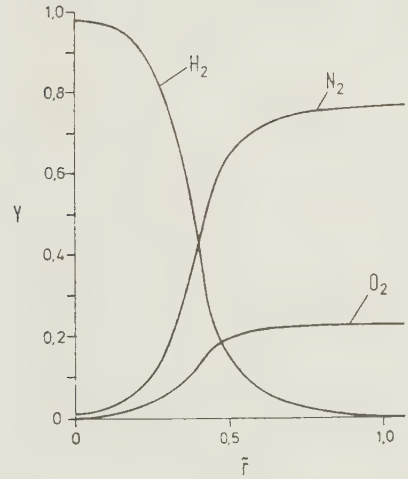


Bild 8.8 Konzentrationen des Freistrahls in $z^* = 2{,}58 \cdot 10^{-2}$

8.3 Ergebnisse der H_2-Luft Diffusionsflamme

Die Abschnitte 8.3.1 bis 8.3.3 beschäftigen sich mit den Ergebnissen der numerischen Berechnungen der H_2-Luft Diffusionsflamme.

Zur Beurteilung der Qualität der numerischen Rechnungen wurden zwei Kontrollen durchgeführt. Zum einen wurde überprüft, ob die berechneten Komponentenkonzentrationen der Bedingung $\sum_{i}^{n_K} Y_i = 1$ genügten. Dies wurde immer erfüllt. Zum anderen wurde eine Elementenstrombilanz der H-Atome durchgeführt, d.h. es wurde kontrolliert, ob das Integral

$$\dot{m}_H = 2\Pi \int_{o}^{r_B} \rho\, u\, \tilde{Y}_H\, r\, dr \qquad (8.24)$$

in jeder Höhe dem aus dem Brennerrohr austretenden Massenstrom des Wasserstoffs entsprach. Hier gab es rechnerische Massenstromverluste, die jedoch in Abhängigkeit von der Zahl der Stützstellen, der Vorwärtsschrittweiten und Flammenlängen nur zwischen 3% und 6% betrugen. Die Abschnitte 8.3.4 und 8.3.5 haben die Ermittlung der Konzentrations- und Temperaturverläufe aus dem Brechungsindexverlauf zum Gegenstand.

8.3.1 Vergleich der berechneten und gemessenen Geschwindigkeitsprofile

Ein Vergleich der mit dem Laser-Doppler-Anemometer gemessen radialen Geschwindigkeitsprofile mit den numerisch berechneten zeigt im Gegensatz zum Freistrahl erhebliche Abweichungen, vor allem in geringer Höhe über der Brenneraustrittsebene. In Bild 8.9 ist der gemessene Geschwindigkeitsverlauf $u^* = u/u_o$ dem berechneten (gestrichelt) in einer Höhe von $z^*_{FL} = 0{,}04$ gegenübergestellt. Als Bezugslängen wurden die berechnete Flammenlänge von 12,5 cm gewählt. $\hat{f}$ wird mit Gleichung (8.3) berechnet. Die weiteren Daten der Flamme sind $u_o = 0{,}5$ m/s, $u_\infty = 0{,}45$ m/s, $r_I = 9$ mm, $r_A = 14$ mm.

Die Lücke in der durch Kreuze dargestellten Meßkurve gibt die Position der in Abschnitt 7.3 schon angesprochenen teilchenlosen Zone wieder.

Die größte relative Abweichung der beiden Profile ist in der Umgebung der Reaktionszone ($\hat{f} = 1{,}91$) festzustellen. Während das berechnete Profil dort ein Minimum aufweist, erreicht das gemessene sein absolutes Maximum und liegt sogar über dem Wert auf der Symmetrieachse.
Ursache für die erhebliche Geschwindigkeitszunahme in der unmittelbaren Umgebung der Reaktionszone ist die im Vergleich zur Umgebungsluft circa 10-fache Volumendehnung der Gase. Die für diese Volumendehnung notwendige Druckdifferenz ist zwar absolut betrachtet klein, die Druckgradienten $\frac{\partial p}{\partial r}$ und $\frac{\partial p}{\partial z}$ dürfen aber zumindest im direkten an die Brenneraustrittsebene anschließenden Bereich nicht vernachläßigt werden, weil hier der Anstieg von Umgebungs- auf Reaktionstemperatur und damit die Druckzunahme auf kleinstem Raum geschieht. T.Hirano und Y.Kanno [53] haben bei der experimentellen Untersuchung einer laminaren Wandgrenzschichtflamme das Druckfeld bestimmt und beträchtliche Druckgradienten in der Reaktionszone festgestellt. Das Auftreten eines nicht zu vernachlässigenden Gradienten $\frac{\partial p}{\partial r}$ verletzt aber

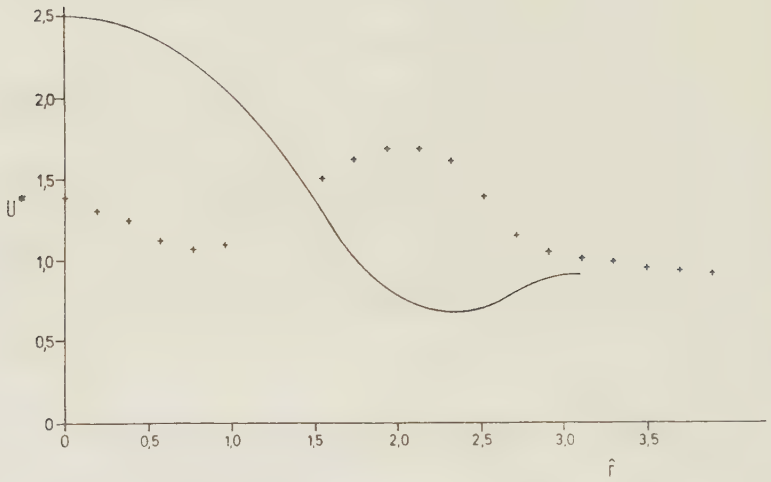


Bild 8.9 Gemessenes (+) und berechnetes radiales Geschwindigkeitsprofil der Flamme in $z^*_{Fl} = 0{,}04$

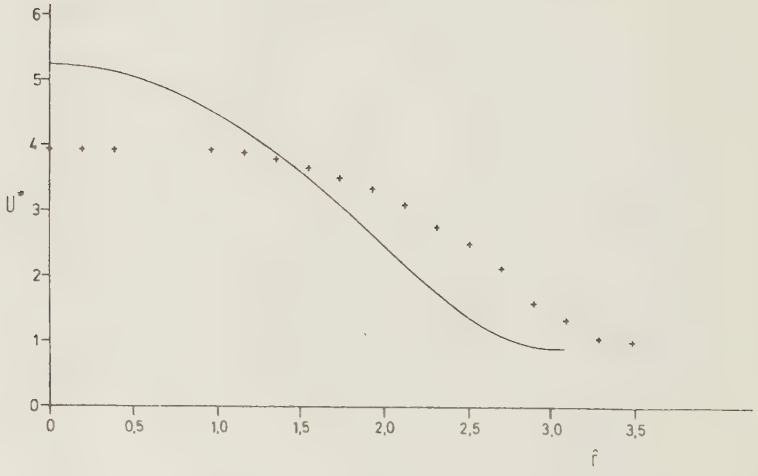


Bild 8.10 Gemessenes (+) und berechnetes radiales Geschwindigkeitsprofil der Flamme in $z^*_{Fl} = 0{,}25$

die bei der Herleitung der Grenzschichtgleichungen erster Ordnung gemachte Annahme konstanten Drucks quer zur Grenzschicht (vgl. [29] S.129). Zur richtigen Beschreibung des Geschwindigkeitsfeldes im untersten Teil der Flamme müßte neben der Impulsbilanzgleichung in axialer Richtung (Gl. (2.2)) auch die bei der Grenzschichtnäherung vernachlässigte Impulsbilanzgleichung quer zur Grenzschicht berücksichtigt werden, in der der Term $\frac{\partial p}{\partial r}$ auftritt. Dies bedeutet, daß entweder die Navier-Stokes-Gleichungen gelöst werden oder ein Grenzschichtkonzept höherer Ordnung verwendet werden, müßte. Beides wäre über den Rahmen dieser Arbeit hinausgegangen.

In größeren Höhen über der Brenneraustrittsebene können die Druckgradienten $\frac{\partial p}{\partial r}$ und $\frac{\partial p}{\partial z}$ jedoch vernachlässigt werden, weil hier das Temperaturprofil breiter geworden ist. Damit ist die Gültigkeit des verwendeten Grenzschichtkonzepts wieder gegeben. Dies zeigt auch die Annäherung zwischen dem berechneten und gemessenen Geschwindigkeitsprofil in einer Höhe von $z^*_{FL} = 0{,}25$ (Bild 8.10). Größere Höhen konnten in Folge einer zu geringen Partikelzahl nicht vermessen werden, es ist aber zu erwarten, daß Rechnung und Messung sich mit wachsender Höhe angleichen.

Die große Abweichung der gemessenen und berechneten Geschwindigkeit auf der Symmetrieachse in geringer Höhe (Bild 8.9) ist ebenfalls eine Folge der höheren axialen Geschwindigkeit in der Umgebung der Reaktionszone der realen Flamme. Im Vergleich zur berechneten Flamme ist aus Kontinuitätsgründen in der realen Flamme der Bereich, der schon von der Reaktion beeinflußt worden ist, schmaler. Die Zone um die Symmetrieachse hat deshalb die Reaktion noch gar nicht "wahrgenommen" und verhält sich ähnlich wie ein H_2-Luft Freistrahl ohne Reaktion. Dies bedeutet für den Auftrieb in dieser Zone, daß er in der realen Flamme hauptsächlich durch den Dichteunterschied zwischen Wasserstoff und Luft bestimmt wird, während er in der berechneten Flamme schon durch die weiter auf die Symmetrieachse vorgedrungenen

Temperatur- und Konzentrationsprofile beeinflußt wird, was letztlich eine höhere Geschwindigkeit auf der Symmetrieachse zur Folge hat.

Das nicht richtig berechnete Geschwindigkeitsfeld der Flamme hat natürlich Auswirkungen auf die Ergebnisse für die Temperatur und die Konzentrationen, weil die Geschwindigkeitskomponenten u und v in den konvektiven Termen aller Gleichungen (Gleichung (2.3) und (2.5)) auftreten. Das verwendete Flammenberechnungsverfahren ist deshalb auch nur bedingt geeignet, um Vergleichswerte für die aus einem Interferogramm bestimmten Temperatur- und Konzentrationsprofile zu liefern. Die Eignung des Berechnungsverfahrens zur Untersuchung des Einflusses der für die Herleitung des Mischungsgrades notwendigen Annahmen gleicher Diffusionskoeffizienten und Le = 1 ist davon allerdings nicht betroffen.

8.3.2 Berechnete Konzentrations-, Temperatur- und Brechungsindexprofile

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der numerischen Rechnung für eine H_2-Luft Flamme erläutert, die folgende Daten aufweist (geometrische Größen sind in Bild 2.1 gezeigt): r_I = 5 mm, r_A = 1o mm, u_o = 0,35 m/s, u_∞ = 0,45 m/s, T_o = 298°K. Aus Gleichung (8.18a) erhält man als Bezugslänge L = 6,53 cm und Gleichung (8.22) liefert Fr = 0,191. Die berechnete Flammenlänge beträgt 2,2 cm. Alle Ergebnisse sind über $\hat{r}$ (Gleichung (8.21)) aufgetragen. Die untersten Profile wurden für eine dimensionslose Höhe z^* = 0,002 berechnet. Aus der Darstellung der Komponentenkonzentrationen in dieser Höhe (Bild 8.11) kann man entnehmen, daß die Reaktionszone bei $\hat{r}$ = 0,96 liegt und der Stickstoff und das Reaktionsprodukt Wasser noch nicht weit in den Kern der Flamme vorgedrungen sind, der bis $\hat{r}$ = 0,42 aus 100% Wasserstoff besteht.

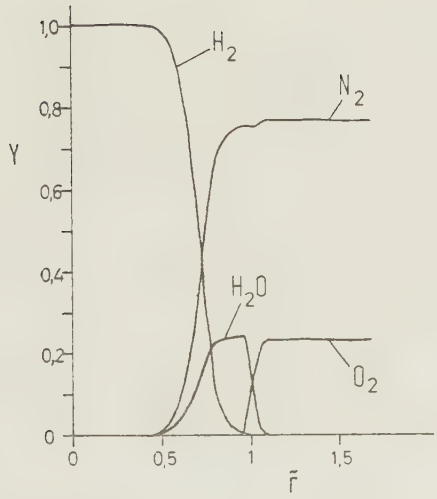


Bild 8.11 Komponentenkonzentrationen in $z^* = 0{,}002$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}006$

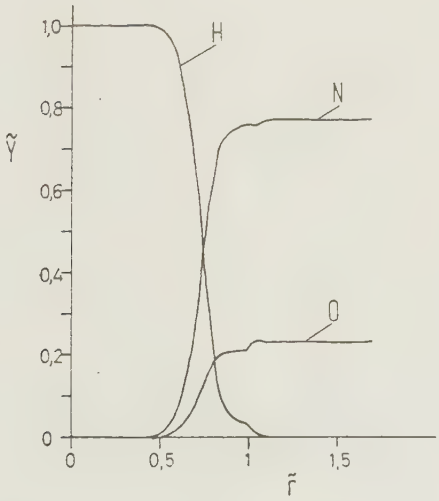


Bild 8.12 Elementenkonzentrationen in $z^* = 0{,}002$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}006$

In Bild 8.12 sind die entsprechenden Elementenkonzentrationen aufgetragen, die die eigentlichen Unbekannten der Elementenerhaltungsgleichungen (2.5) sind und deshalb in dieser Höhe einmal exemplarisch gezeigt werden sollen. Der Verlauf von $\tilde{Y}_N$ ist mit dem Y_{N_2} in Bild 8.12 identisch, da die N-Atome in der gesamten Flamme nur im N_2-Molekül vorkommen. Entsprechend gilt für die Verläufe von $\tilde{Y}_H$ und Y_{H_2} bzw. $\tilde{Y}_O$ und Y_{O_2} in den Bereichen, in denen $Y_{H_2O} = 0$ gilt (vgl. Gleichung (5.30) und (5.36)). Die Schwingungen in den Profilen der Elementenkonzentrationen in der Nähe der Reaktionszone ($\hat{r} = 0{,}96$) sind keine Folge numerischer Instabilität, sondern durch die selektive Diffusion bedingt. Der Transport der verschiedenen Atome hängt von den Diffusionseigenschaften der Moleküle ab, in denen sie gebunden sind. Der Transport der O-Atome wird z.B. innerhalb der von der Reaktionsfläche eingeschlossenen Zone (Zone I in Bild 5.5) nur von den Diffusionseigenschaften des H_2O bestimmt, die sich von denen des O_2 unterscheiden. Dadurch kommt es zu der Schwingung im Profil der Elementenkonzentration des Sauerstoffs. Anologes gilt für den Verlauf von $\tilde{Y}_H$. Die Delle im Profil von $\tilde{Y}_N$ bzw. Y_{N_2} sind ein Ergebnis der veränderten Zusammensetzung des Gasgemisches im Bereich der Reaktionszone, wodurch gemäß Gleichung (3.15) die polynären Diffusionseigenschaften von N_2 beeinflußt werden. Diese Schwingungen treten nicht auf, sobald man die Annahme gleicher lokaler Diffusionskoeffizienten aller Komponenten macht (siehe Bild 8.30), da es für den Transport der Atome dann unerheblich ist, in welchem Molekül sie gebunden sind.

Das Profil der dimensionslosen Temperatur T^* in Bild 8.13 zeigt in einem Bereich, der der Ausbreitung des Produktes H_2O entspricht, einen steilen Anstieg auf das Temperaturniveau der Reaktion.

Die Verläufe der axialen und radialen Geschwindigkeitskomponenten u^* und $-v^*$ in Bild 8.14 sind ein Indiz für die im letzten Abschnitt gemachte Feststellung, daß im unterem Teil

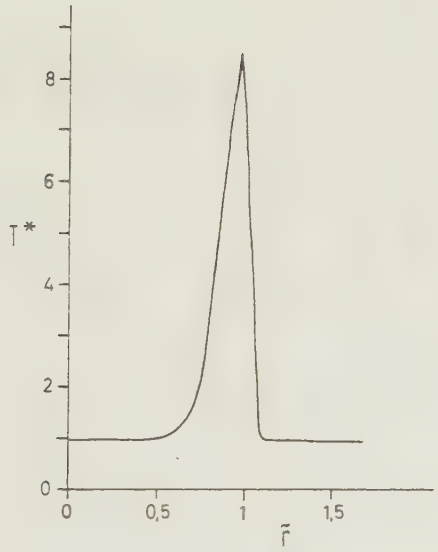


Bild 8.13 Temperaturprofil in $z^* = 0{,}002$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}006$

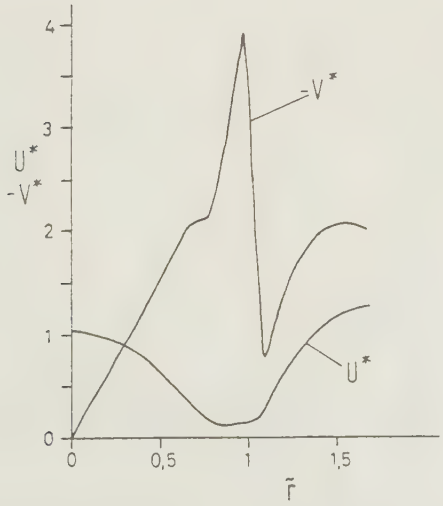


Bild 8.14 Geschwindigkeitsprofile der u^* und $-v^*$ Komponenten in $z^* = 0{,}002$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}006$

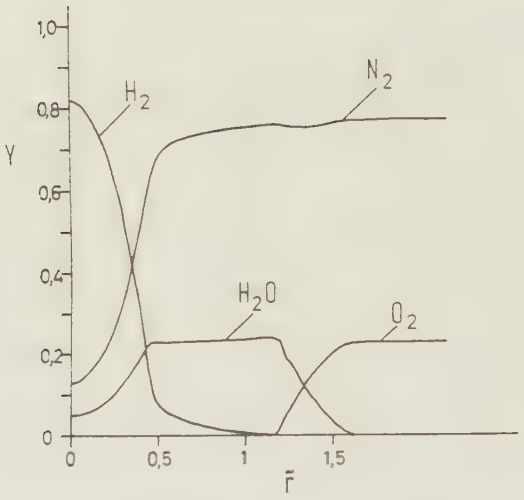


Bild 8.15 Konzentrationen in $z^* = 0{,}0372$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}11$

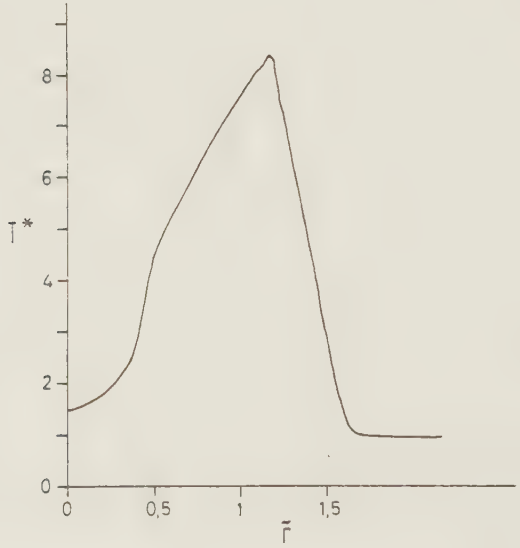


Bild 8.16 Temperaturprofil in $z^* = 0{,}0372$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}11$

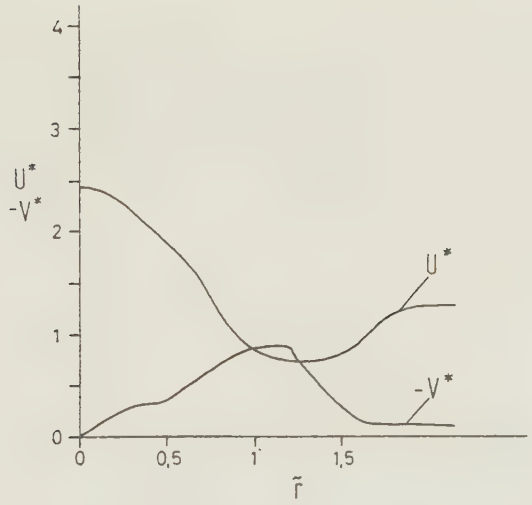


Bild 8.17 Geschwindigkeitsprofile der Komponenten u^* und $-v^*$ in $z^* = 0{,}0372$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}11$

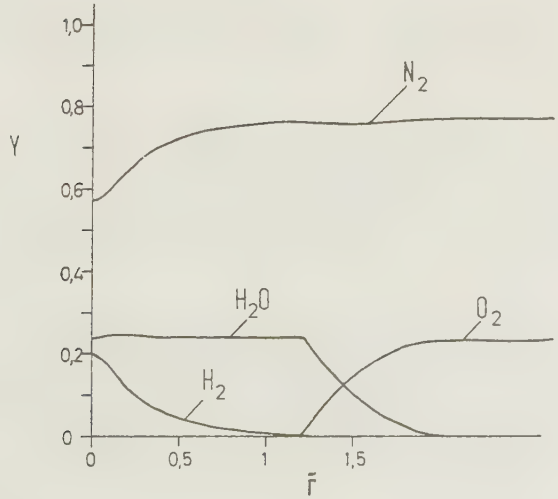


Bild 8.18 Konzentrationen in $z^* = 0{,}124$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}37$

der Flamme die axiale Impulsgrenzschichtgleichung nicht ausreicht, um das Geschwindigkeitsfeld richtig zu beschreiben. In der Berechnung findet die starke Volumendehnung in der Reaktionszone allein Niederschlag in einer Erhöhung der radialen Geschwindigkeitskomponente - v^*, die den 25-fachen Wert der axialen Komponente u^* annimmt, statt, wie es sein müßte, auch u^* zu vergrößern.

Die Bilder 8.15 bis 8.17 geben die Verhältnisse in der Höhe $z^* = 0{,}0372$ wieder. Die Reaktionszone ist weiter nach außen auf $\hat{f} = 1{,}17$ gewandert, und die Vermischung des H_2-Kernstrahls mit N_2 und H_2O ist fortgeschritten. Aus Bild 8.17 ist ersichtlich, das in der Reaktionszone $u^* \approx - v^*$ ist. Deshalb liegt die Vermutung nahe, daß von dieser Höhe aufwärts, die etwa 1/10 der berechneten Flammenlänge entspricht, die Impulsgrenzschichtgleichung (2.2) die Situation wieder richtig beschreibt. Dies bedeutet jedoch nicht, daß von dieser Höhe an die Geschwindigkeitsergebnisse der durchgeführten Rechnung der Realität entsprechen, sondern, daß eine Grenzschichtrechnung, die erst hier beginnt, bessere Resultate liefern würde. Voraussetzung für die Durchführung einer derartigen Rechnung wäre allerdings, daß die Zustände der Flamme in dieser Höhe bekannt sind und als Anfangswerte für die Rechnung dienen können.

Die Bilder 8.18 und 8.19 geben die Konzentrationen und Temperatur in der Höhe $z^* = 0{,}124$ wieder. In dieser Höhe hat die Reaktionszone ihren größten Abstand von der Symmetrieachse erreicht. Für $z^* > 0{,}124$ bewegt sie sich wieder auf die Symmetrieachse zu.

Das Y_{H_2O} - Profil zeigt in halber Flammenhöhe bzw. $z^* = 0{,}17$ (Bild 8.20 und 8.21) auf der Symmetrieachse eine sogar geringfügig höhere Konzentration als in der Reaktionszone selber. (0,25 gegenüber 0,24). Dieses Phänomen, das sich nicht beobachten läßt, wenn man gleiche Diffusionskoeffizienten voraus-

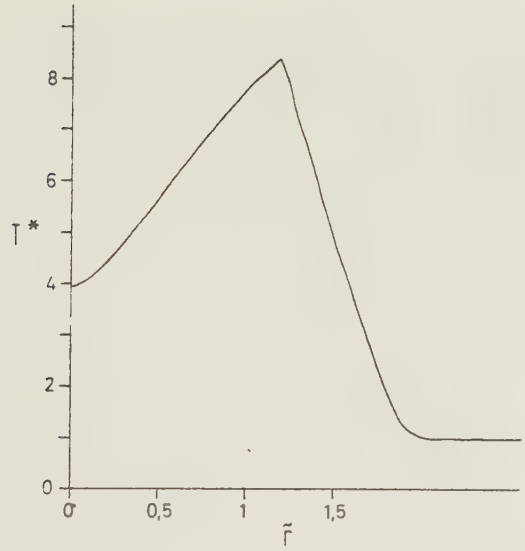


Bild 8.19 Temperaturprofil in $z^* = 0{,}124$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}37$

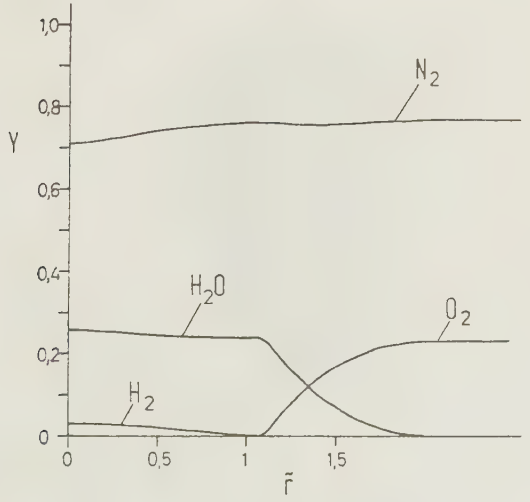


Bild 8.20 Konzentrationen in $z^* = 0{,}17$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}5$

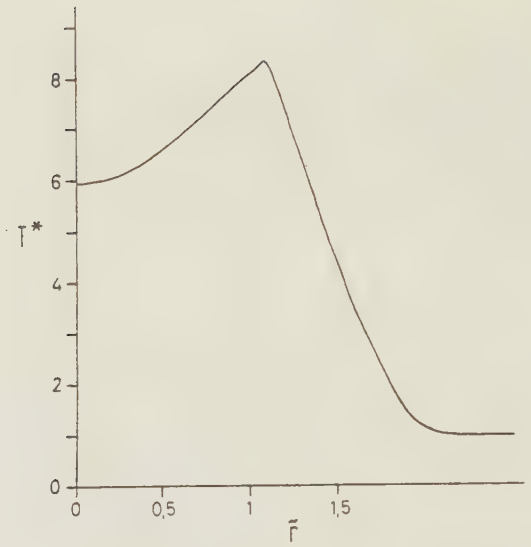


Bild 8.21 Temperaturprofil in $z^* = 0{,}17$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}5$

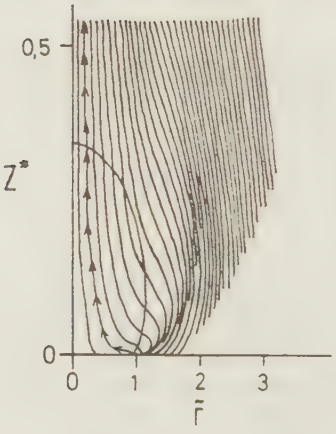


Bild 8.22 Berechnetes Stromlinienbild mit eingezeichneter Flammenkontur

setzt und die Thermodiffusion vernachlässigt (vgl. Bild 8.34), hat seine Ursache in der schon beschriebenen Delle im Y_{N_2} Profil auf unterster Höhe der Flamme (Bild 8.11). Da in der Flammenfläche $Y_{N_2} + Y_{H_2O} = 1$ gilt, kann im untersten Teil der Flamme infolge der Delle im N_2-Profil ein etwas größerer H_2O-Anteil entstehen, als in höheren Regionen, in denen die Delle zunehmend aufgefüllt wird. Eine Erklärung dafür, warum sich die etwas höhere H_2O-Konzentration in den untersten Reaktionszonen in größeren Höhen auf der Symmetrieachse wiederfinden, liefert das berechnete Stromlinienbild 8.22 der Flamme, in dem die Flammenkontur eingezeichnet ist. Die mit Pfeilen versehene Stromlinie durchdringt die Flammenfläche an unterster Stelle, nähert sich der Symmetrieachse an, um schließlich die Flamme im Bereich der Spitze zu verlassen. Es existiert also ein Konvektionsstrom, der die unteren höheren H_2O-Konzentrationen in die Flamme hineinträgt. Der Diffusionsstrom des H_2O, der dem Konvektionsstrom überlagert ist, ist ebenfalls auf die Symmetrieachse gerichtet, sodaß schließlich von einer gewissen Höhe an sich das in Bild 8.20 gezeigte Y_{H_2O}-Profil einstellt.

Die Stromlinien einer realen Flamme werden wahrscheinlich aufgrund der kleineren radialen Strömungsgeschwindigkeit schwächer gekrümmt sein. Qualitativ gibt Bild 8.22 die Situation aber richtig wieder, wie sich bei der Beobachtung der Bahnen von der Flamme zugesetzten TiO_2-Teilchen zeigt, die bei den gegebenen Temperaturen ein starkes Eigenleuchten aufweisen. Die Bilder 8.23 und 8.24 zeigen die Konzentration und Temperaturen in der Höhe $z^* = 0{,}241$. Die Bilder 8.25 und 8.26 geben die Situation unmittelbar oberhalb der Flammenspitze wieder ($z^* = 0{,}343$). Der Brechungsindexverlauf in der Flamme ist für verschiedene Höhen in den Bildern 8.27 und 8.28 dargestellt. In der untersten Höhe $z^* = 0{,}002$ (Bild 8.27) hat $(n-1)$ im Kern der Flamme den Wert von H_2 bei 298^oK ($n-1=1{,}36\cdot10^{-4}$), fällt mit zunehmender Annäherung an die

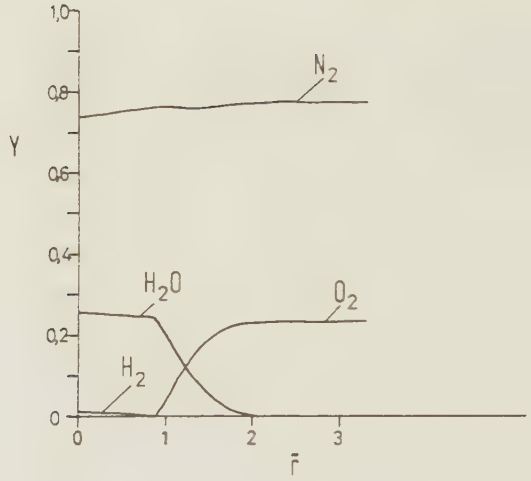


Bild 8.23 Konzentrationen in $z^* = 0{,}241$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}715$

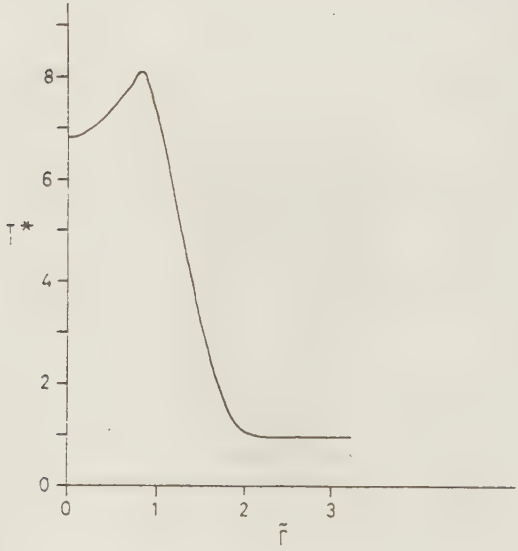


Bild 8.24 Temperaturprofil in $z^* = 0{,}241$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}715$

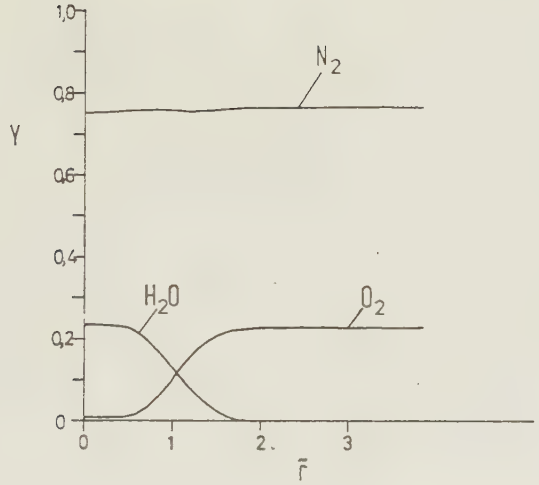


Bild 8.25 Konzentrationen in $z^* = 0{,}343$ bzw. $z^*_{Fl} = 1{,}01$

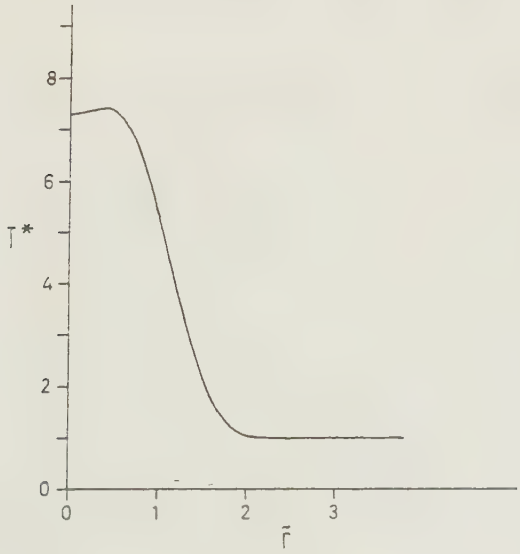


Bild 8.26 Temperaturprofil in $z^* = 0{,}343$ bzw. $z^*_{Fl} = 1{,}01$

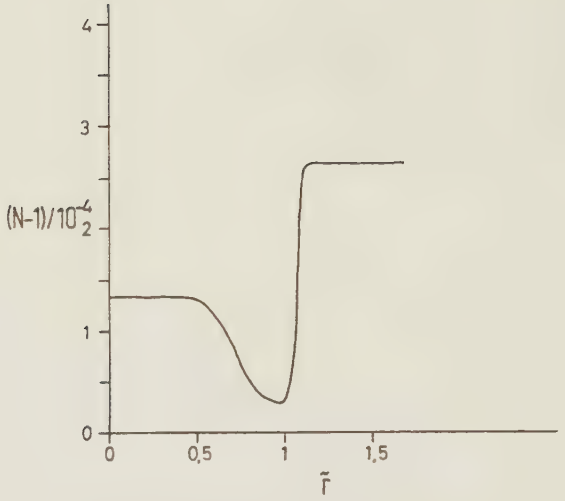


Bild 8.27 Brechungsindexprofil in der Flamme in $z^* = 0{,}002$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}006$

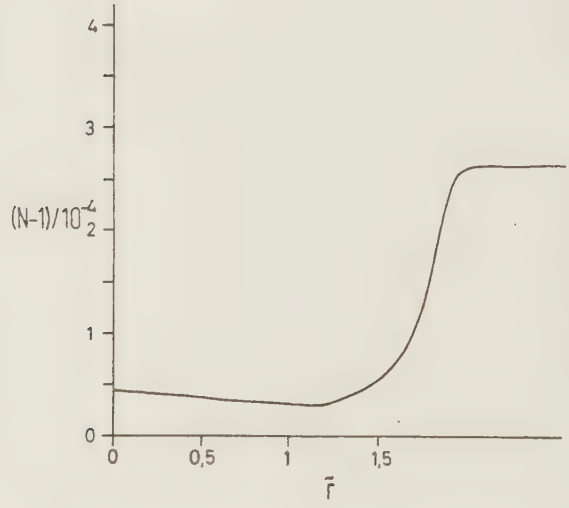


Bild 8.28 Brechungsindexprofil in der Flamme in $z^* = 0{,}241$ bzw. $z^*_{Fl} = 0{,}715$

Flammenfläche auf den Wert in der Reaktionszone ab ($n-1 = 0{,}3 \cdot 10^{-4}$) und steigt dann auf den Wert von Luft bei $298^{\circ}K$ ($n-1=2{,}68 \cdot 10^{-4}$). Mit größer werdendem z^* (Bild 8.28) nimmt der Anteil von N_2 und H_2O ebenso wie die Temperatur im Kern der Flamme zu, wodurch $(n-1)$ sich dem Wert in der Reaktionszone annähert. Das Minimum der $(n-1)$-Profile liegt auf allen Höhen in der Reaktionszone, es ist allerdings in höheren Regionen der Flamme nur schwach ausgeprägt. Der Wert von $(n-1)$ in der Reaktionszone steigt von $0{,}3 \cdot 10^{-4}$ für $z^*=0{,}002$ auf $0{,}33 \cdot 10^{-4}$ für $z^*=0{,}337$ an. Dieser Anstieg ist bei näherungsweise gleichbleibender Gaszusammensetzung in der Reaktionszone auf die Verringerung der Reaktionstemperatur von $2550^{\circ}K$ auf $2320^{\circ}K$ zurückzuführen (Vgl. Bild 8.13 und 8.26).

8.3.3 Einfluß der Annahmen gleicher Diffusionskoeffizienten und Le = 1

Voraussetzung für die Herleitung des für die interferometrische Auswertung der Flamme benötigte Mischungsweges f (Kapitel 4) waren die Annahmen gleicher Diffusionskoeffizienten aller Komponenten und Le = 1. Um den Einfluß dieser Annahmen auf die Flamme abschätzen zu können, wurde das in Abschnitt 6.3 beschriebene numerische Berechnungsverfahren entsprechend modifiziert. Statt der Elementenerhaltungsgleichung in der Form (2.5) mit polynärer Diffusion und Thermodiffusion wird Gleichung (4.4) mit einem für alle Komponenten gleichen Diffusionskoeffizienten verwendet. In der Enthalpiegleichung (2.3) wird nicht der Enthalpevektor j_q in der Form (2.4), sondern in der durch die Einführung von Le = 1 vereinfachten Form (4.7) benutzt. Der Algorithmus des modifizierten Berechnungsverfahrens unterscheidet sich nicht von dem in Bild 6.3 gezeigten.

Der gemeinsame Diffusionskoeffizient D aller Komponenten konnte einfach aus der Bedingung Le = 1 (vgl. Gleichung (4.5a)) bestimmt werden

$$D = \frac{\lambda}{\rho c_p} \tag{8.25}$$

Die in Abschnitt 8.3.2 dargestellte Flamme wurde noch einmal mit dem modifizierten Programm berechnet. Vergleicht man die Ergebnisse mit denen in Abschnitt 8.3.2, dann ergibt sich, daß die Flamme unter Einfluß der Annahmen gleicher Diffusionskoeffizienten und Le = 1 länger (2,9 cm statt 2,2 cm) und schlanker (14mm statt 14,8 mm Durchmesser) wird. Die Bezugslänge (Gleichung 8.18a) behält aber den gleichen Wert (6,53 cm) bei wie im vorigen Abschnitt. Um dennoch eine gewisse Vergleichbarkeit zu erzielen, gelten die in den Bildern 8.29 bis 8.37 gezeigten Ergebnisse für einige Höhen, in denen die auf die berechnete Flammenlänge von 2,9 cm bezogene dimenionslose Koordinate z^*_{Fl} die gleichen Werte annimmt wie in Abschnitt 8.3.2.

Die auffälligsten Unterschiede sind:

1. Die Elementenkonzentrationen weisen infolge der gleichen Diffusionskoeffizienten aller Komponenten keine Schwingungen auf (vgl. Bild 8.30 und 8.12).

2. Im unteren Teil der Flamme läuft die Diffusion aller Komponenten schneller ab. Dadurch ist in den unteren Höhen, der Anteil von N_2 und H_2O im Kern der Flamme größer und der von H_2 geringer (Vgl. Bild 8.32 und 8.15).

3. Das Y_{H_2O}-Profil hat sein Maximum immer in der Reaktionszone.

4. Die Gaszusammensetzung in der Reaktionszone ist ebenso wie die Reaktionstemperatur für alle Höhen annähernd gleich. Dies entspricht der Tatsache,daß der Mischungsgrad (4.10) bzw. (4.11), der ja ebenfalls eine Lösung der Gleichungen (4.4) und (4.8) ist, in der Reaktionszone für beliebige Höhen nur den einzigen Wert f_{st} = 0,02818 (vgl. Gleichung (5.41)) annimmt.

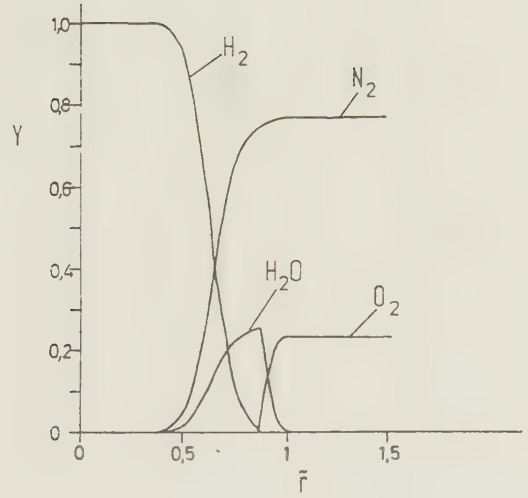


Bild 8.29 Konzentrationen unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=D$ für $z^*_{Fl} = 0{,}006$ (vgl. Bild 8.11)

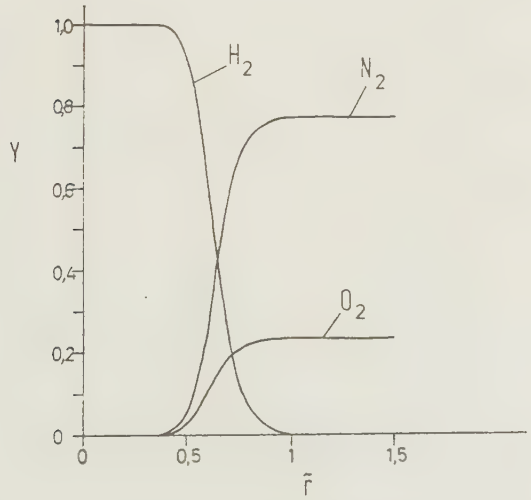


Bild 8.30 Elementenkonzentrationen unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=D$ für $z^*_{Fl} = 0{,}006$ (vgl. Bild 8.12)

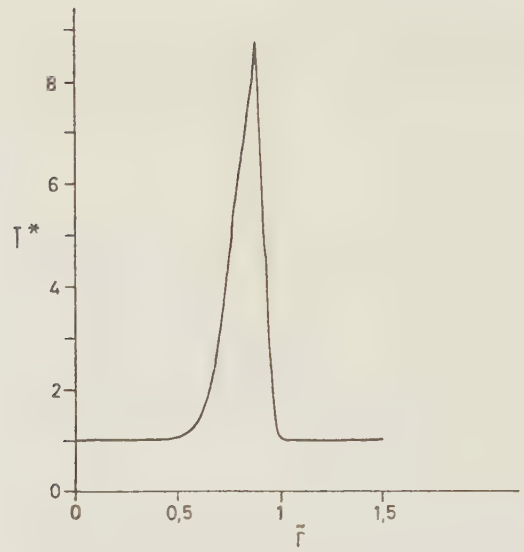


Bild 8.31 Temperaturprofil unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=D$ in $z^*_{F1} = 0{,}006$ (vgl. Bild 8.13)

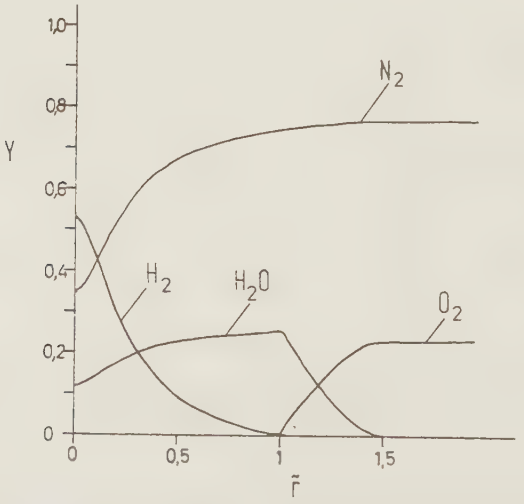


Bild 8.32 Konzentrationen unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=D$ in $z^*_{F1} = 0{,}11$ (vgl. Bild 8.15)

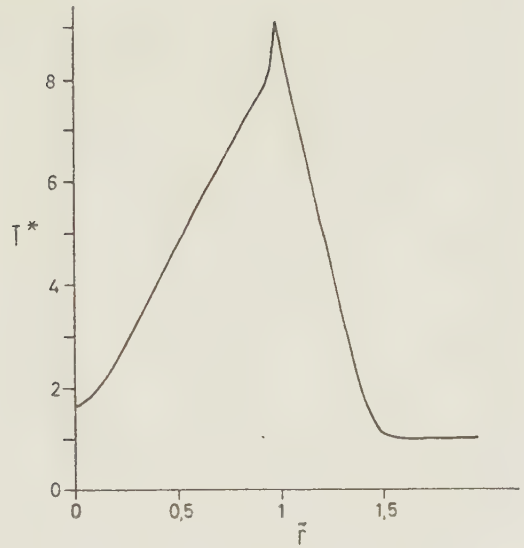


Bild 8.33 Temperaturprofil unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=D$ in $z^*_{Fl} = 0{,}11$ (vgl. Bild 8.16)

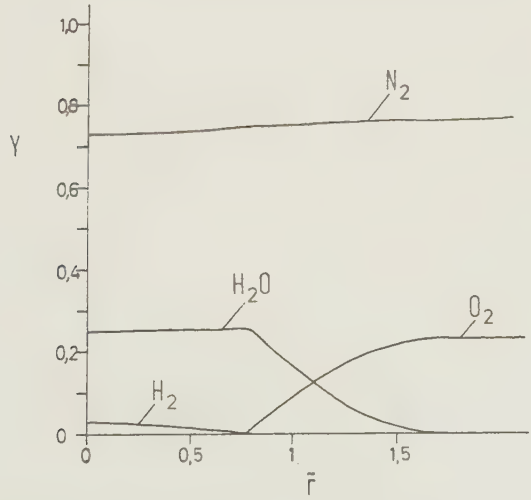


Bild 8.34 Konzentrationen unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=D$ in $z^*_{Fl} = 0{,}5$ (vgl. Bild 8.20)

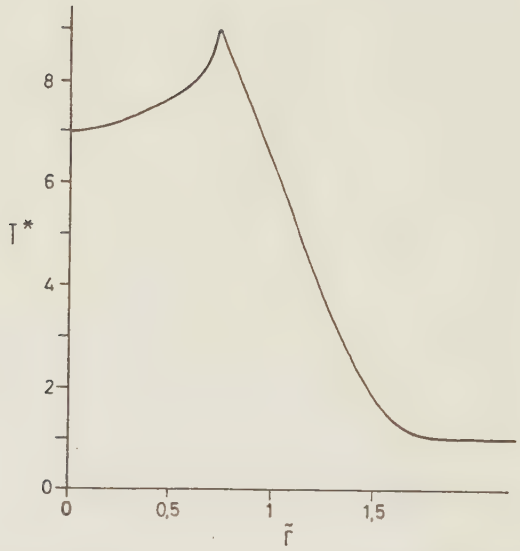


Bild 8.35 Temperaturprofil unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=$
in $z^*_{F1} = 0,5$ (vgl. (bild 8.20)

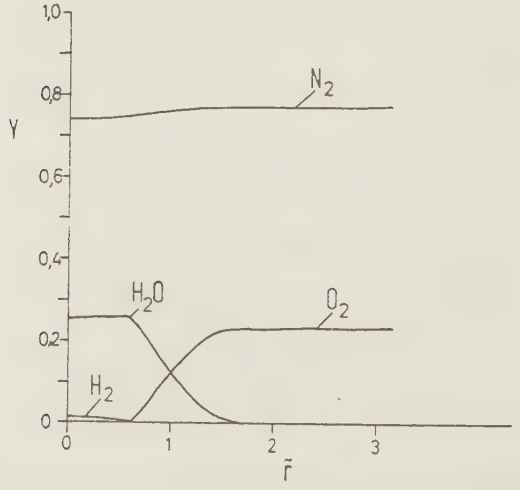


Bild 8.36 Konzentrationen unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=$
in $z^*_{F1} = 0,715$ (vgl. Bild 8.13)

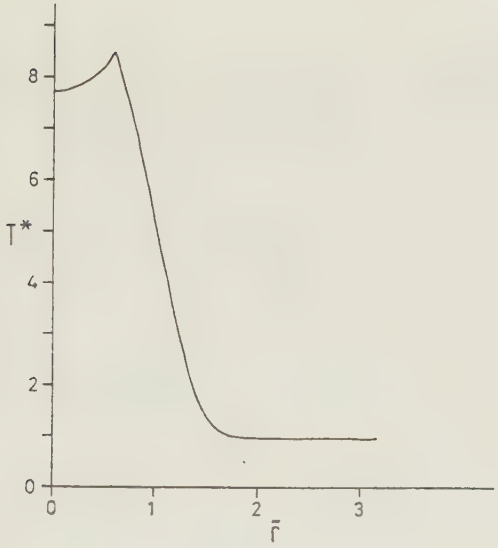


Bild 8.37 Temperaturprofil unter Annahme von Le=1 und $D_{ij}=D$ in $z^*_{F1} = 0{,}715$ (vgl. Bild 8.24)

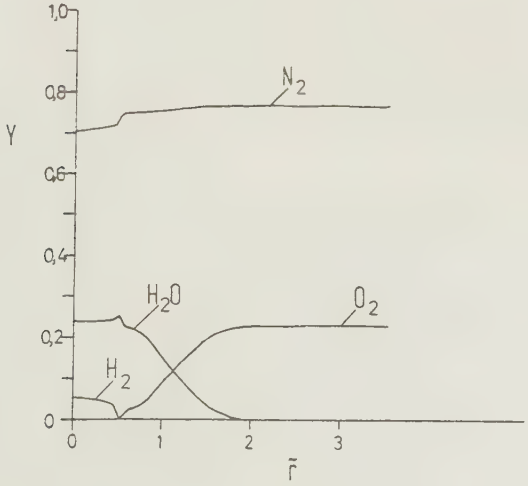


Bild 8.38 Unkorrigierte aus dem berechneten Brechungsindexprofil ermittelte Konzentrationen in $z^* = 0{,}312$ bzw. $z^*_{F1} = 0{,}9$

Weil die Konzentrationen und Temperatur in der Reaktionszone nur Funktion von f_{st} sind (siehe Gleichung (4.14) - (4.17) und (5.24) - (5.27)), müssen auch sie unabhängig von der Höhe sein.

8.3.4 Ermittlung der Konzentrationen und Temperatur aus den berechneten Brechungsindexprofilen als qualitativer Test des Auswerteverfahrens

In diesem Abschnitt soll abgeschätzt werden, wie groß die Fehler bei der Ermittlung der Konzentrationen und Temperatur aus dem Brechungsindex sind, die prinzipiell dadurch zustandekommen, daß das gemessene (n-1)-Profil einer Flamme in einem Verfahren Verwendung findet, das auf der Annahme gleicher Diffusionskoeffizienten und Le = 1 basiert. Für diesen Zweck bietet sich die Möglichkeit an, anstelle der aus einem Interferogramm bestimmten Brechungsindexprofile die berechneten (n-1)-Profile des Abschnitts 8.3.2 zu verwenden und die Ergebnisse mit den dort gezeigten zu vergleichen. Dieses Vorgehen schließt alle Meßfehler aus, die durch die ungenaue Bestimmung des Brechungsindizes aus dem realen Interferogramm entstehen können. Die Konzentrations- und Temperaturprofile erhält man dadurch, daß man für einzelne Werte des berechneten (n-1)-Profils aus Bild 5.6 die entsprechende Temperatur und Konzentrationskombination der Komponenten abliest und über dem Radius aufträgt. Die Variablen in Bild 5.6 besitzen alle jeweils zwei Lösungsäste, die sich an der Stelle von $n-1 = 0{,}3 \cdot 10^{-4}$ (Flammenfläche) berühren. Die Lösungsäste, deren (n-1)-Intervall zwischen $0{,}3 \cdot 10^{-4}$ und $0{,}132 \cdot 10^{-3}$ liegt gelten für die Zone I der Flamme (Bild 5.5), diejenigen zwischen $0{,}3 \cdot 10^{-4}$ und $0{,}268 \cdot 10^{-3}$ für die Zone II. Die berechneten (n-1)-Profile weisen nun in der Reaktionszone einen Wert auf, der vor allem für größere Höhen z^* über $0{,}3 \cdot 10^{-4}$ liegt, sodaß ein kontinuierlicher Übergang von dem einen auf den anderen Lösungsast nicht möglich ist. Dies bedeutet, daß zwischen den Lösungsästen gesprungen werden muß, sobald das Miminum des (n-1)-Profiles durchlaufen wird.

Für das Minimum selber, d.h. für die Flammenfläche aber müssen wegen der Forderung $Y_{H_2} = 0$ und $Y_{O_2} = 0$ die Temperatur und Konzentration an der Stelle $n-1 = 0{,}3 \cdot 10^{-4}$ gelten. Dieses Sprungverhalten ist in Bild 8.38 das für $z^* = 0{,}312$ bzw 9/1o der berechneten Flammenlänge gilt, deutlich an den Knicken in den Konzentrationsverläufen zu erkennen. Verwendet man anstelle der numerisch berechneten (n-1)-Werte diejenigen einer realen Flamme, dann verstärkt sich dieser Effekt noch, weil in diesem Fall der minimale (n-1)-Wert noch mehr über $0{,}3 \cdot 10^{-4}$ liegt. Dieses unerwünschte Verhalten kann mit einen einfachen Korrekturansatz für die gemessenen bzw. berechneten $(n-1)_g$-Werte vermieden werden.

$$n-1 = (n-1)_g - [(n-1)_{g,min} - 0{,}3\ 10^{-4}] \frac{(n-1)_{H_2,298} - (n-1)}{(n-1)_{H_2,298} - (n-1)_{g,min}} \qquad (8.26)$$

Durch den Ansatz (8.26) wird erreicht, daß einerseits das Minimum des gemessenen $(n-1)_g$-Verlaufes auf den für die Auswertung notwendigen Wert von $0{,}3 \cdot 10^{-4}$ abgesenkt wird, andererseits der $(n-1)_{H_2,298}$-Wert des Wasserstoffs bei Umgebungstemperatur keine Korrektur mehr erfährt. Dies bedeutet, daß der Ansatz nur für den Bereich $(n-1)_g \leq (n-1)_{H_2,298}$ angewendet werden darf, für $(n-1)_g > (n-1)_{H_2,298}$ wird keine Korrektur mehr durchgeführt.

In den Bildern 8.39 bis 8.45 sind die Konzentrations- und Temperaturprofile, die aus den berechneten n-1.Verläufen verschiedener Höhen z^* bzw. z^*_{FL} bestimmt wurden, dargestellt. Die folgenden qualitativen Aussagen behalten ihre Gültigkeit auch für Profile, die aus gemessenen (n-1)-Verläufen einer realen H_2-Luft Diffusionsflamme ermittelt werden.

1. In geringen Höhen z^*_{FL} gibt es eine gute Übereinstimmung der Konzentrationsprofile (vgl. Bild 8.39 und 8.11).

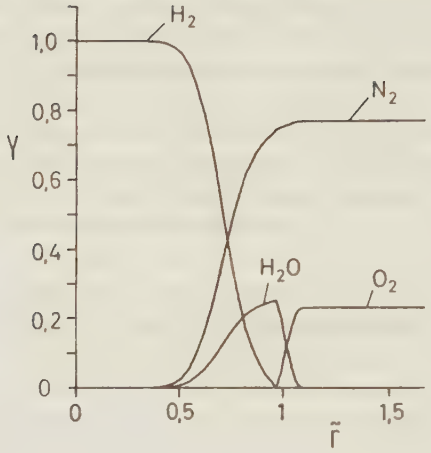


Bild 8.39 Aus dem berechneten Brechungsindexverlauf resultierende Konzentrationen in $z^*_{Fl} = 0{,}006$ (vgl. Bild 8.11)

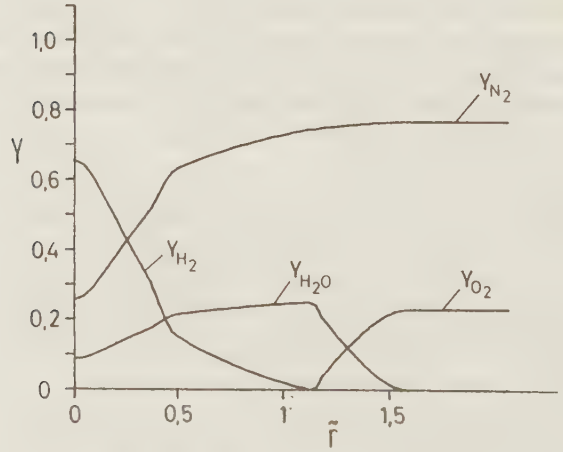


Bild 8.40 Aus dem berechneten Brechungsindexverlauf resultierende Konzentrationen in $z^*_{Fl} = 0{,}11$ (vgl. Bild 8.15)

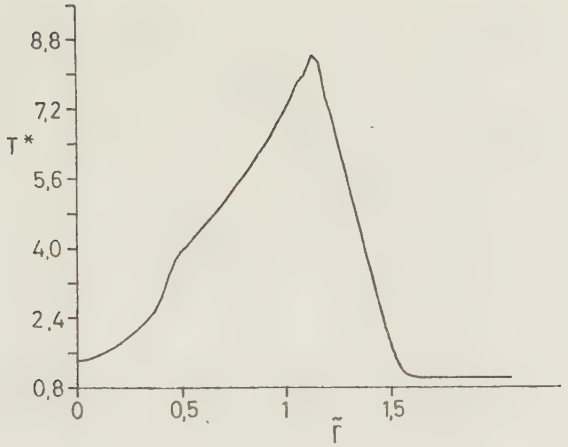


Bild 8.41 Aus dem berechneten Brechungsindexverlauf resultierendes Temperaturprofil in $z^*_{Fl} = 0{,}11$ (vgl. Bild 8.16)

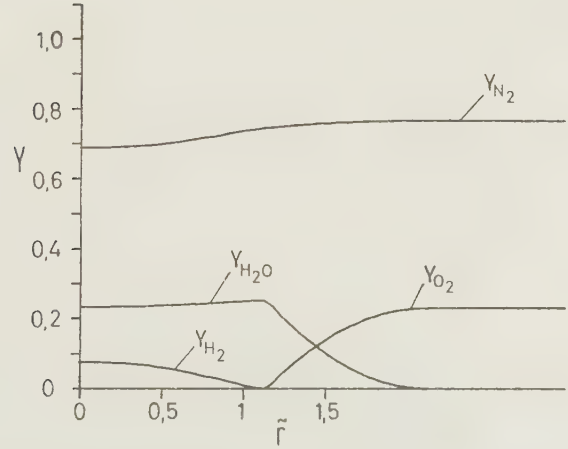


Bild 8.42 Aus dem berechneten Brechungsindexverlauf resultierenden Konzentrationen in $z^*_{Fl} = 0{,}5$ (vgl. Bild 8.20)

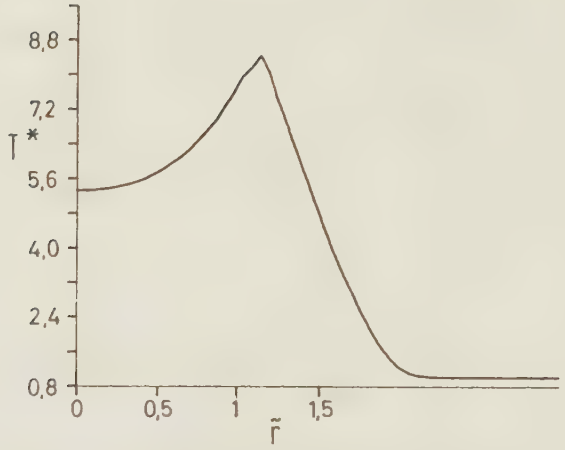


Bild 8.43 Aus dem berechneten Brechungsindexverlauf resultierendes Temperaturprofil in $z^*_{Fl} = 0{,}5$ (vgl. Bild 8.21)

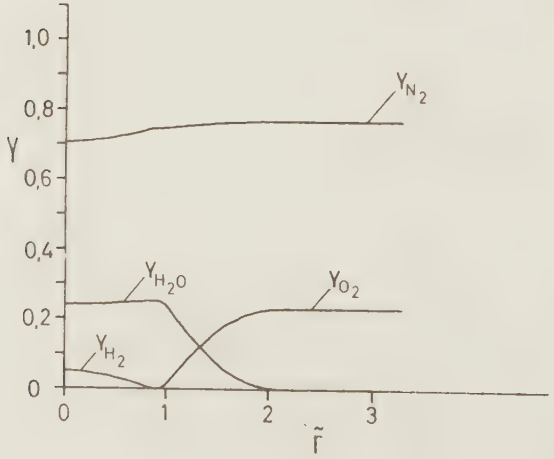


Bild 8.44 Aus dem berechneten Brechungsindexverlauf resultierende Konzentrationen in $z^*_{Fl} = 0{,}715$ (vgl. Bild 8.23)

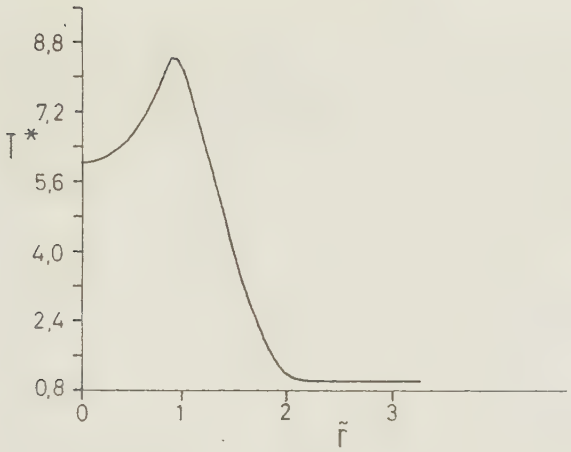


Bild 8.45 Aus dem berechneten Brechungsindexverlauf resultierendes Temperaturprofil in $z^*_{Fl} = 0{,}715$ (vgl. Bild 8.24)

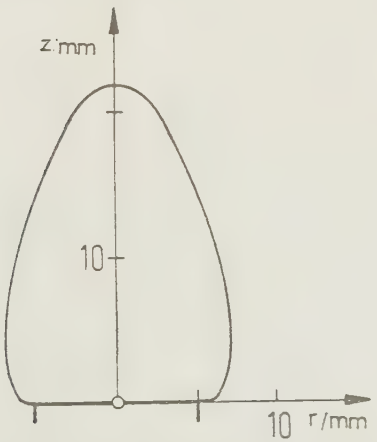


Bild 8.46 Von einer Farbfotografie abgezeichnete Flammenkontur der experimentell untersuchten Flamme

2. Im Bereich zwischen $z^*_{FL} = 0{,}05$ und $z^*_{FL} = 0{,}4$ ist die Diffusion weiter fortgeschritten. Deshalb haben Y_{H_2O} und Y_{N_2} auf der Symmetrieachse in Bild 8.4o einen höheren Wert als in Bild 8.15, während Y_{H_2} entsprechend geringer ist. Die aus dem (n-1)-Verlauf bestimmten Profile stellen eine Zwischenform der Ergebnisse in Abschnitt 8.3.2 und 8.3.3 dar.

3. Von $z^*_{FL} = 0{,}4$ an gilt das umgekehrte Verhalten. Die Y_{H_2} -Konzentration liegen jetzt über den berechneten Werten (vgl. Bild 8.42 und 8.2o)

4. Der Ort der Reaktionszone wird für alle Höhen richtig wiedergegeben, vorausgesetzt, daß das Minimum des (n-1)-Verlaufes am Ort der Reaktion liegt. Für die berechneten (n-1)-Profile ist dies gegeben, bei den gemessenen Profilen können sich infolge von Meßfehlern große Verschiebungen der Minimumposition ergeben (siehe Abschnitt 8.3.5).

5. Die Temperatur in der Reaktionszone wird in allen Höhen, besonders für größere z^*_{FL} zu hoch (vgl. Bild 8.45 und 8.24).

8.3.5. Interferometrisch gemessene Konzentrations- und Temperaturprofile

Die H_2-Luft Diffusionsflamme mit den in Abschnitt 8.3.2 genannten Daten wurde experimentell mit dem Mach-Zehnder Interferometer untersucht (Bild 7.6). Von einer Farbfotografie der Flamme wurde ihre Kontur abgezeichnet (Bild 8.46). Der Radius der größten Flammenbreite wurde aus diesem Bild zu 7,3 mm bestimmt und entspricht damit recht genau dem berechneten Wert (7,4 mm). Die Flammenlänge liegt ebenfalls in der Nähe der Rechnung. Bei der Bestimmung der diskreten Flammenlänge aus Bild 8.46 blieb jedoch eine gewisse Unsicherheit, weshalb das Resultat der Rechnung (2,2 cm) als Bezugslänge für z^*_{FL} gewählt wurde.

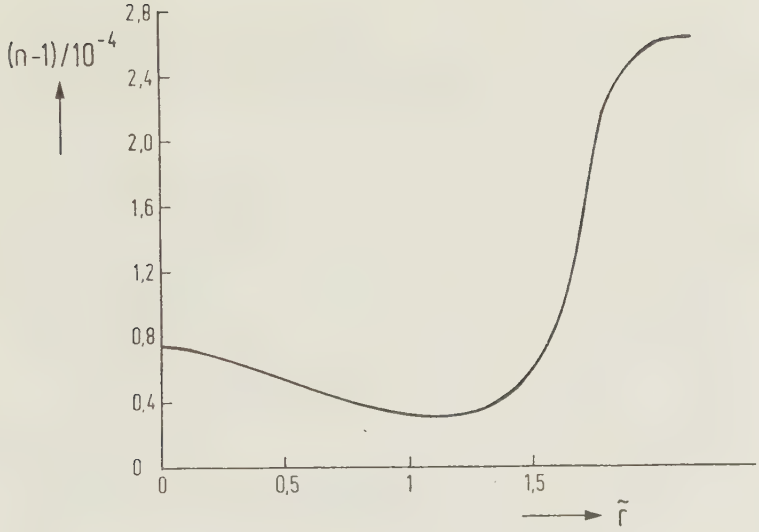


Bild 8.47 Aus dem Interferogramm bestimmter (n-1)-Verlauf in $z^*_{Fl} = 0,19$

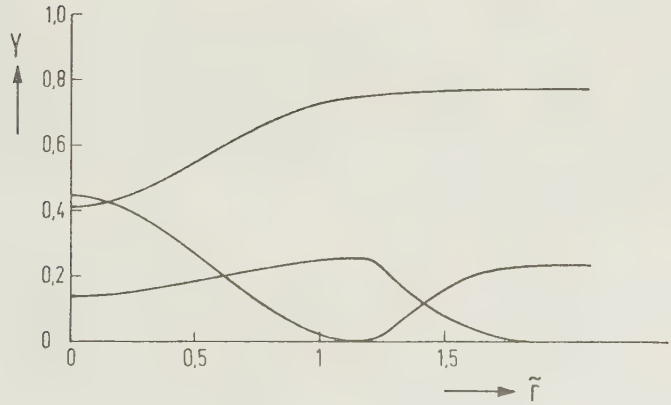


Bild 8.48 Die aus dem obigen (n-1)-Verlauf resultierenden Konzentrationen

In geringer Höhe, d.h. in unmittelbarer Nähe des Brennerrohres ist eine Auswertung nicht möglich, da das durch die Flamme erwärmte Brennerrohr eine zusätzliche Wärmequelle darstellt, die die Auswertung verfälscht.

In Bild 8.47 ist der (n-1)-Verlauf in z = 4,2 mm bzw. z^*_{Fl} = 0,19 gezeigt. (Gleichung (8.22)) Das Minimum des Profils ist gut erkennbar und sein Ort stimmt mit der Reaktionszone in Bild 8.46 in dieser Höhe überein. Die aus diesem Verlauf resultierenden Konzentrations- und Temperaturprofile sind in Bild 8.48 und 8.49 dargestellt. Vor der Auswertung wurde der in Bild 8.47 gezeigte Verlauf noch einer Korrektur gemäß Gleichung (8.26) unterzogen. Die Form der Profile ähnelt erwartungsgemäß den Ergebnissen der Rechnungen für Le = 1 (vgl. 8.3.4), die Konzentrationen auf der Symmetrieachse liegen jedoch näher bei den Ergebnissen der vollständigen Rechnung in dieser Höhe (vgl. 8.3.2). In der Höhe z = 1,o2 cm bzw. z^*_{FL} = 0,46 ist eine Auswertung, die sich allein auf den (n-1)-Verlauf (Bild 8.5O) stützt, nicht mehr möglich. Der flache Verlauf der Kurve läßt erhebliche Unsicherheit in der Bestimmung des Minimums zu. Deshalb wurde der Ort der Reaktionszone und damit die Stelle, an der die Gültigkeit der Lösungsäste in Bild 5.6 wechselt, aus der Fotografie genommen. Die Ergebnisse sind in Bild 8.51 und 8.52 zu sehen. In den höheren Bereichen der Flamme muß große Sorgfalt bei der Bestimmung des (n-1)-Verlauf aus dem Interferogramm angewandt werden, da schon kleine Niveauschwankungen des fast ebenen (n-1)-Verlaufes im inneren Teil der Flamme zu erheblichen Änderungen der resultierenden Konzentrationen führen können.

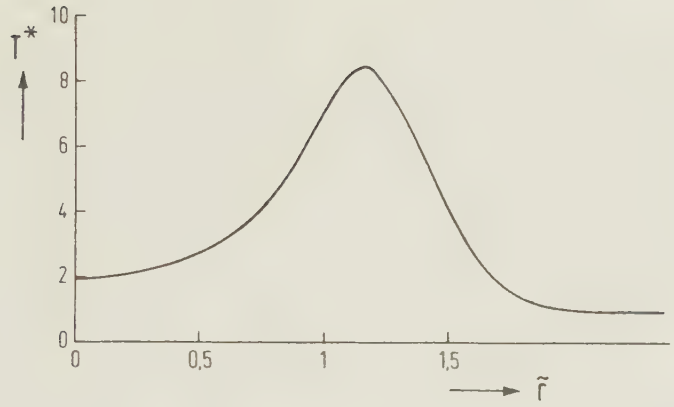


Bild 8.49 Das aus dem (n-1)-Verlauf in Bild 8.47 resultierende Temperaturprofil

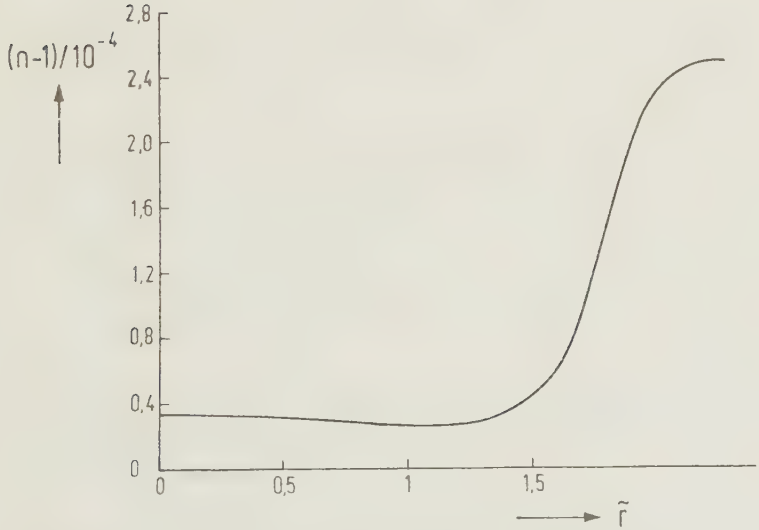


Bild 8.50 Aus dem Interferogramm bestimmter (n-1)-Verlauf in $z^*_{F1} = 0,46$

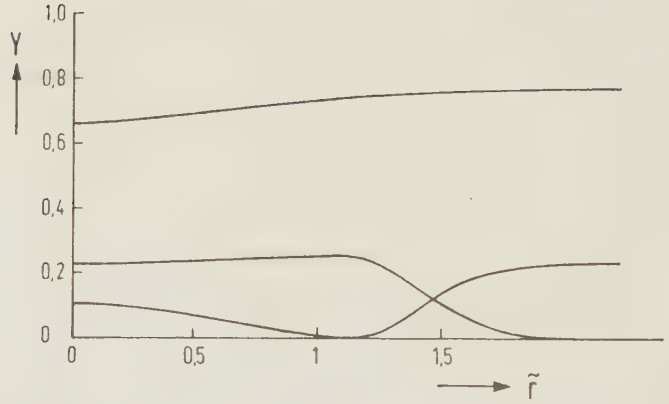


Bild 8.51 Aus dem (n-1)-Verlauf in Bild 8.50 resultierende Konzentrationen

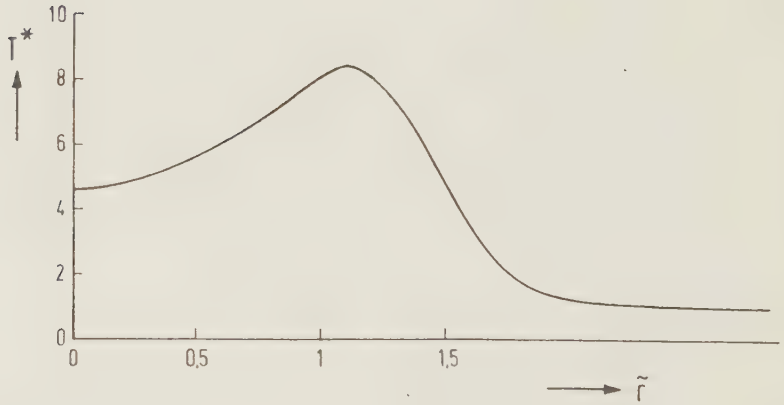


Bild 8.52 Mit dem (n-1)-Verlauf in Bild 8.50 bestimmtes Temperaturprofil

8.4 Schlußfolgerungen

Das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren zur Bestimmung von Konzentrationen und Temperatur aus dem interferometrisch gemessenen Brechungsindex einer laminaren, rotationssymmetrischen Diffusionsflamme geht von der Vorstellung eines bestimmten Flammenmodells aus. Die Modellhaftigkeit der Flamme besteht in den Annahmen der Gültigkeit des Flammenflächenmodells, gleicher lokaler Diffusionskoeffizienten aller Komponenten und der Vorstellung, daß der Transport von Energie und Partialmasse gleich schnell verläuft (Le = 1).

Das Modell der Flammenfläche wird um so besser erfüllt, je schneller die Reaktion abläuft, d.h. je größer die Damköhler-Zahl ist.

Der Voraussetzung gleicher lokaler Diffusionskoeffizienten kommt man nahe, wenn die Gase der Flamme sich wie ein binäres Gemisch verhalten. Dies ist der Fall, wenn es in der Flamme näherungsweise nur zwei Klassen von Molekulargewichten gibt, und die chemischen Komponenten sich entweder der einen oder der anderen Klasse zuordnen lassen (vgl. auch 5.1.2).

Der Einfluß der beiden letzten Modellvorstellungen wird zudem dadurch gemildert, daß gemessene Brechungsindexverteilungen einer realen Flamme als Eingangsgrößen für das Auswerteverfahren verwendet werden. Die daraus resultierenden Profile der Konzentrationen und der Temperatur liegen in ihrem Verlauf, wie aus den Ergebnissen des Abschnitts 8.3.4 zu schließen ist, zwischen denen der Modellflamme und der realen Flamme.

Die mit dem Verfahren bestimmten Temperaturen werden wegen der nicht berücksichtigten Strahlungsverluste und der über der Höhe nicht veränderten Gaszusammensetzung in der Reaktionszone über denen der realen Flamme liegen.

Von erheblichem Einfluß auf die Qualität der Ergebnisse ist die Genauigkeit, mit der die Brechungsindexverteilung aus dem Inter-

ferogramm ermittelt werden kann. Wie bereits in Abschnitt 7.2.2 geschildert, haben geringe Meßfehler bei der Bestimmung der Position der Interferenzlinien Auswirkungen auf den Verlauf des Brechungsindexprofils. Ein fehlerhaftes (n-1)-Profil hat besonders in oberen Regionen der Flamme größere Abweichungen in den resultierenden Konzentrations- und Temperaturverläufen zur Folge, weil hier der größte Teil des (n-1)-Profils auf niedrigem Niveau verläuft (vgl. Bild 8.50) und geringe Schwankungen des (n-1)-Werte deshalb große Auswirkungen haben (vgl. Bild 5.6).

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß es gelungen ist, aus einem Interferogramm die Konzentrations- und Temperaturverläufe einer H_2-Luft Diffusionsflamme zu bestimmen, und daß diese Werte den Ergebnissen der numerischen Rechnung nahe kommen.

9. Zusammenfassung

Es wurden die Grenzschichtgleichungen zusammengestellt, die die die Bilanz von Impuls, Elementen und Energie in einer laminaren, rotationssymmetrischen Diffusionsflamme bzw. einem Mehrkomponenten-Freistrahl beschreiben. Außerdem wurden Bestimmungsgleichungen für die Stoffwerte angegeben, die die Konzentrations- und Temperaturabhängigkeit berücksichtigen.

Unter den Postulaten gleicher lokaler Diffusionskoeffizienten und Le = 1 wurde eine Kopplungsbeziehung ("Mischungsgrad") zwischen den Elementenkonzentrationen und der Enthalpie hergeleitet, die es erlaubt, die Elementenerhaltungsgleichungen und die Enthalpiegleichung auf eine einzige Gleichung zu reduzieren.
Mit Hilfe des Mischungsgrades und dem Gladstone-Dale Gesetz wurden für den Mehrkomponenten-Freistrahl wie auch für die Flamme quantitative Verfahren entwickelt, mit denen die Komponentenkonzentrationen und die Temperatur aus dem mit einem Interferometer gemessenen Brechungsindex ermittelt werden können. Im Fall der Flamme wurde dabei die Gültigkeit des Flammenflächenmodells angenommen.

Der Mehrkomponenten-Freistrahl und die H_2-Luft Diffusionsflamme wurden numerisch mit einem Differenzenverfahren berechnet. Die numerische Lösung erfolgte in einem dem Problem besonders angepaßten Koordinatensystem. Die Berechnungen der Flamme, bei denen auch vom Flammenflächenmodell ausgegangen wurde, wurden mit und ohne den Annahmen gleicher lokaler Diffusionskoeffizienten und Le = 1 durchgeführt. Auf diese Weise konnten die Auswirkungen dieser Postulate, deren Gültigkeit bei der Herleitung des Verfahren zur quantitativen Auswertung des Brechungsindex angenommen wurde, ermittelt werden.

Die Ergebnisse von Rechnung und Experiment wurden in dimensionsloser Form dargestellt. Dazu wurden die Grenzschichtgleichungen mit geeigneten Bezugsgrößen dimensionslos gemacht und anschließend die Reynolds-Zahl durch die Grenzschichttransformation eliminiert. Aus den Ergebnissen der numerischen Rechnungen ergab sich, daß die Ähnlichkeitseigenschaften der Darstellung verbessert werden, wenn man die Flammenlänge als Bezugslänge wählt. Um jedoch die Bezugslänge a priori aus den Anfangsbedingungen bestimmen zu können, wurde nicht die Flammenlänge als Bezugslänge für die Darstellung der Ergebnisse gewählt, sondern eine Länge, die proportional zum Quotienten aus Volumenstrom und Diffusionskoeffizienten ist.

Die ohne einschränkende Postulate berechneten Brechungsindexprofile der Flamme wurden benutzt, um die Güte des Verfahrens zur Bestimmung der Konzentrationen und Temperatur aus dem Brechungsindex festzustellen.

Im experimentellen Teil wurden die Geschwindigkeiten im Freistrahl und in der Flamme mit einem Laser-Doppler-Anemometer gemessen und mit den Ergebnissen der Rechnung verglichen. Im Fall des Freistrahls konnte eine gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Messung festgestellt werden. Die gemessenen Geschwindigkeitsprofile der Flamme wiesen jedoch vor allem in geringen Höhen über der Austrittsebene erhebliche Abweichungen gegenüber der Rechnung auf. Die Ursache dafür liegt in der Tatsache, daß die Impulsgrenzschichtgleichung die lokalen Druckgradienten in axialer und radialer Richtung nicht berücksichtigt. Aus den Ergebnissen der numerischen Rechnung kann geschlossen werden, daß oberhalb von ca. 1/10 der Flammenlänge die Grenzschichtnäherungen wieder gelten.

Mit einem Mach-Zehnder Interferometer wurden Interferogramme der Flamme angefertigt und daraus in verschiedenen Höhen Brechungs-

indexprofile bestimmt. Anschließend wurden mit dem hier entwickelten Verfahren aus diesen Profilen die Konzentrations- und Temperaturverläufe ermittelt. Anhand eines Vergleiches mit den numerischen Rechnungen ergibt sich eine Aussage über die Güte des Verfahrens.

10. Literaturverzeichnis

[1] Kinder,W. — Theorie des Mach-Zehnder Interferometers
Optik 1,413-448,1946

[2] Smigielski,P. Royer,H. — Application de l'holographie à aerodynamique
L'Onde Électrique 48,223-225,1968

[3] Hailer-Hamann,D. Schönbucher,A. — Synchronfotografie
Bild der Wissenschaften 11 48,88-95,1977

[4] Schultz-Grunow,F. Wortberg,G. — Interferometrische Messungen an einer ebenen laminaren Flamme
Int. J. Heat Mass Transfer 2,56-80,1961

[5] Belotserkovsky,S.M. — Anwendungsmöglichkeiten und Perspektiven optischer Methoden in der Gasdynamik
Proceed. 8th Int. Congress on High-Speed Photography,410-414,Almquist & Wiksell, Stockholm,1968

[6] Sweeney,D. Vest,C.M. — Rekonstruction of three dimensional refractive index fields from multi-dimensional interferometric data
App. Opt. 12,2649-2664,1973

[7] Merzkirch,W. — Flow Visualization
Academic Press,New York,1974

[8] Weinberg,F.J. — Optics of Flames
Butterworth & Co,London,1963

[9] Olsen,H.L. 3rd Int. Symp. Combustion,663, Williams & Wilkins,Baltimore,1949

[10] Bershader,D. Some aspects of refractive behavior of gases Modern Optical Methods in Gas Dynamic Research,65-83,Plenum,New York,1971

[11] Pandya,T.P. Weinberg,F.J. The structure of flat, counter-flow diffusion flames Proc. Roy. Soc. A 279,544-561,1964

[12] Rosenhead,L. Laminar boundary layer Clarendon Press,Oxford,1963

[13] Peters,N. An Asymptotic Analysis of Nitric Oxid Formation in Turbulent Diffusion Flames Combustion Science and Technology 19, 39-49,1978

[14] Rohsenow,W.M. Developments in Heat Transfer The M.I.T. Press,Cambridge,1964

[15] Hirschfelder,J.O. Curtis,C.F. Byran-Bird,R. Molecular Theory of Gases and Liquids John Wiley & Sons,New York,1954

[16] Lees,L. Convective heat transfer with mass addition and chemical reactions Combustion and Propulsion,Third AGARD Colloquium,451-498,Pergamon Press, New York,1958

[17] Becker,H.A. Effect of concentration fluctuations in turbulent diffusion flames, Fifteenth Symposium (International) on Combustion

[18] Peters,N. Analysis of Laminar Flat Plate Boundary Layer Diffusion Flame
Int. J. Heat Mass Transfer 19,385-393, 1976

[19] Peters,N. Strömungen chemisch reagierender Gase
Skriptum zur Vorlesung an der RWTH-Aachen 1979

[20] Mason,E.A.
Saxena,S.C. Approximate formula for thermal conductivity of gas mixtures
Physics Fluid 1,361-369,1958

[21] Reid,R.C.
Sherwood,T.K. The Properties of Gases and Liquids
Mc Graw-Hill,New York,1960

[22] Jost,W. Diffusion
Academic Press Inc. ,New York,1960

[23] Straub,D. Die polynären Thermodiffusionskoeffizienten von Gasgemischen
Wärme und Stoffübertragung 3,211-219,1970

[24] Yun,K.S.
Mason,E.A. Collision integrals for transport properties of dissociating air at high temperature
Physics Fluid 5,380-386,1962

[25] Spalding,D.B. Combustion and Mass Transfer
Pergamon Press,Oxford,1978

[26] Burke,S.P.
Schumann,T.E.W. Diffusion Flames
Ind. Eng. Chem. 29,998,1928

[27] Günther,R. Verbrennung und Feuerung
Springer Verlag,Berlin,1974

[28] Rörtgen,H.G. Experimentelle und numerische Berechnung einer laminaren rotationssymmetrischen Wasserstoff-Sauerstoff-Diffusionsflamme
Wärme- und Stoffübertragung 10,33-50,1977

[29] Schlichting,H. Boundary-Layer Theory
McGraw-Hill,New York,1979

[30] Smith,G.D. Numerische Lösungen von partiellen Differentialgleichungen
Vieweg,Braunschweig,1970

[31] Collatz,L. The numerical treatment of differential equations
Springer Verlag,Berlin,1966

[32] Falk,S. Eine Variante zum Differenzenverfahren
ZAMM 45,Sonderheft T32,1965

[33] Weinberg,B.C.
Leventhal S.H.
Ciment,M. The operator compact implicit scheme for viscous flow problems

[34] Gampert,B. Grenzschichttheoretische Probleme des aerodynamischen Schmelzspinnprozesses
Dissertation TU-Berlin,1973

[35] Gampert,B. Numerische Methoden in der Fluiddynamik
Skriptum zur Vorlesung an der G.H.-Essen, 1978

[36] Merzkirch,W. Generalized analysis of shearing interferometers as applied for gas dynamic studies
Appl. Opt. 13,409-413,1974

[37] Sernas,V. The Wollaston Prism Schlieren Interferometer
v. Karman Institute for Fluid Dynamic Lecture Series 96,1977

[38] Schardin,H Theorie und Anwendung des Mach-Zehnderschen Interferenz-Refraktometer
Z. Instrumentenkunde 53,396-403

[39] Kinder,W. Theorie des Mach-Zehnder Interferometers und Beschreibung eines Gerätes mit Einspiegeleinstellung
Optik 1,413-448,1946

[40] Ladenburg,R.
Bershader,D. Interferometry
Physical Measurements in Gas Dynamics and Combustion,47-78,
Princeton University Press,Princeton,1954

[41] Schardin,H. Die Schlierenverfahren und ihre Anwendung
Ergeb. Exakt. Naturwissenschaften 20,
303-439,1942

[42] Durst,F.
Mellnig,A.
Whitelaw,H. Principles and Practice of Laser-Doppler Anemometry
Academic Press,New York,1976

[43] Abbiss,J.B.
Chubb,T.W.
Pike,E.R. Laser Doppler Anemometry
Optics and Laser Technology,249-261,1974

[44] Durst,F.
Mellnig,A.
Whitelaw,J.H. The Application of Optical Anemometry to Measurements in Combustion Systems
Combustion and Flame 18,197-201,1972

[45] Mellnig,A.
Whitelaw,J.H.
Seeding of Gas Flow for Laser Anemometry
Disa Information No. 15,1973

[46] Arqawal,J.K.
Johnson,E.M.
Generating Aerosol for Laser Velocimeter Seeding
TSI-Quarterly 3,1981

[47] Altgeld,H.
Laser-Doppler Messungen in einer turbulenten Wasserstoff-Luft Diffusionsflamme
Dissertation RWTH-Aachen,1978

[48] Altgeld,H.
Generator zu Erzeugung von Festkörperpartikeln für die Laser-Doppler Anemometrie in Flammen
Report HT 79/2,Inst. f. Technische Thermodynamik,RWTH-Aachen

[49] Turner,J.S.
Buoyancy Effects in Fluids
Cambridge University Press,1973

[50] Hess,K.
Flammenlänge und Flammenstabilität
Dissertation TH-Karlsruhe,1964

[51] Kremer,H
Berechnung der Länge von Erdgasflammen
Gas Wärme international 16,73-78,1967

[52] Reekers,R.
Interferenzoptische- und Laser-Doppler Messungen
Diplomarbeit Ruhr-Universität Bochum,1981

[53] Hirano,T.
Kanno,Y.
Aerodynamic and thermal structures of the laminar boundary layer over a flat plate with a diffusion flame
14th Symposium on Combustion,Pittsburgh, 1973

[54] Dreszer — Mathematik Handbuch
VEB Fachbuchverlag,Leipzig,1975

[55] Zurmühl,R. — Praktische Mathematik für Ingenieure und Physiker
Springer Verlag,Berlin,1965

11. Die wichtigsten Bezeichnungen

a	Abstand vom virtuellen Ursprungs eines Freistrahl
a_{ik}	Anzahl des k-ten Atoms im i-ten Molekül
C	Chapman-Rubesin Parameter (Gl.(6.14))
c_p	Wärmekapazität
$\tilde{c}_p$	mittlere Wärmekapazität
D_{ij}	polynärer Diffusionkoeffizient
D_i^T	Thermodiffusionskoeffizient
D	für alle Komponenten lokal gleicher Diffusionskoeffizient
$\mathcal{D}_{ij}$	binärer Diffusionskoeffizient
f	Mischungsgrad (Gl.(4.10),(4.11),(5.4))
F	dimensionslose Stromfunktion (Gl.(6.7))
$F(T)$	Funktion (Gl.(5.50))
Fr	Froude-Zahl (Gl.(8.13))
g	Erdbeschleunigung
Gr	Graßhoff-Zahl (Gl.(6.15))
h	spez. Enthalpie
$h^o_{i,298}$	Bildungsenthalpie
j_i	Diffusionsstrom
j_q	Enthalpiestrom
J_i	transformierter Diffusionsstrom (Gl.(6.22))
$\hat{J}_i$	transformierter Diffusionsstrom (Gl.(6.63) und (8.11))
$\acute{J}_q$	transformierter Enthalpiestrom (Gl.(8.9))
J_{fi}	fiktiver Diffusionsstrom (Gl.(6.23))
k	Gladstone-Dale Konstante
l	optischer Weg
L	Bezugslänge

L_b	numerisch berechnete Flammenlänge
Le	Lewis-Zahl (Gl.(4.5))
$Le_{i,j}$	polynäre Lewis-Zahl (Gl.(8.15))
Le_i^T	Lewis-Zahl der Thermodiffusion (Gl.(8.16))
m	Masse
$\tilde{m}$	atomare Masse
$\dot{m}$	Massenstrom
M	Molekulargewicht
$\bar{M}$	mittleres Molekulargewicht
$\tilde{M}$	Atomgewicht
n	Brechungsindex
N	Zahl der Stützstellen
n_E	Zahl der Elemente
n_K	Zahl der Komponenten
n_l	Zahl der Kreisringe (Kap. 7.)
p	Druck
Pr	Prandtl-Zahl (Gl.(8.14))
r	Radius
$\hat{r}$	transformierter Radius (Gl.(8.4) und (8.20))
R	spez. Gaskonstante
$\tilde{R}$	allgemeine Gaskonstante
s	geometrischer Weg
S	Stützstellenwert in Kap. 6. bzw. Steifenabstand in Kap. 7.
Sc	Schmidt-Zahl
T	Temperatur
u	axiale Geschwindigkeit
u_D	Diffusionsgeschwindigkeit
$\bar{u}$	Unbekannte in Gl.(6.17)
$\bar{u}^*$	Schätzwert für $\bar{u}$
v	radiale Geschwindigkeit
$\bar{v}$	Unbekannte in Gl.(6.17)
$\hat{v}$	transformierte radiale Geschwindigkeit (Gl.(8.5))

W	Abkürzung (Gl.(6.46) und (6.68))
Y	Komponentenkonzentration
$\tilde{Y}$	Elementenkonzentration
z	axiale Koordinate
z^*_{Fl}	auf die berechnete Flammenlänge bezogene z Koordinate
ΔS	Streifenauslenkung

$\Delta\eta$	} Schrittweiten
$\Delta\xi$	
ε	Reaktionszahl
η	transformierte radiale Koordinate
λ	Wärmeleitfähigkeit oder Wellenlänge
Λ	Terme der Näherungsfunktion in Kap. 6.
μ	dynamische Viskosität
ν	kinematische Viskosität
ξ	transformierte axiale Koordinate
ρ	Dichte
$\bar{\rho}$	bezogene Dichte (Gl.(6.19))
Σ	Näherungsfunktion in Kap. 6.
ψ	Stromfunktion

Indizes

o	Anfangszustand auf der Symmetrieachse
∞	äußerer Rand
$*$	dimensionslose Größe (hochgestellt)
A	in der Außenströmung (siehe Bild 2.1)
B	äußere Berechnungsgrenze
g	gemessen

H, H_2	atomarer bzw. molekularer Wasserstoff
H_2O	Wasser (gasförmig)
i	i-te Komponente
I	Rand des Brennerrohres (siehe Bild 2.1)
k	k-tes Element
n,m	Indizierung der Stützstellen in Kap. 6.
N, N_2	atomarer bzw. molekularer Stickstoff
O, O_2	atomarer bzw. molekularer Sauerstoff
Q	Quelle
r	Referenzzustand
st	stöchiometrisch
U	Umgebung

η	Ableitung nach η
	Näherungsindex (hochgestellt)
ξ	Ableitung nach ξ

12. Anhang: Einzelheiten zur numerischen Rechnung

Anlaufrechnung

Aus der Form des Differenzenmoleküls (Bild 6.2) ist erkenntlich, daß die Zustände auf den beiden ersten Linien (ξ_{m-2}, ξ_{m-1}) bekannt sein müssen. Da die Schrittweiten des Differenzenmoleküls nicht äquidistant sein müssen, besteht die Möglichkeit, die beiden Anfangslinien nahe aneinanderzulegen und anzunehmen, daß ihre Zustände gleich sind. Dies entspricht der Vorstellung, daß beide Linien noch in der ungestörten Anströmumg liegen. Das gewählte Anfangsverhältnis $\frac{\Delta\xi_2}{\Delta\xi_1} = 5$ bereitet der parabolischen Approximationsfunktion (6.40) keine Probleme.
Neben den in Abschnitt 6.2.1 und 6.3.1 genannten Anfangswerten müssen u.a. die Größen C, $\frac{\partial C}{\partial \eta}$ und $\bar{v}$ vorgegeben werden. Der modifizierte Chapman-Rubesin Parameter C (Gleichung (6.14)) geht für ρ = konst in die übliche Definition

$$C = \frac{\rho \quad \nu}{\rho_\infty \quad \nu_\infty} \tag{12.1}$$

über. Daraus folgt die Vorgabe

$\xi = a$

$0 \leq \eta \leq \eta_I$ $\qquad\qquad$ $\eta_I < \eta \leq \eta_A$

$$C = \frac{\rho_o \ \nu_o}{\rho_\infty \ \nu_\infty} \qquad\qquad C = 1 \tag{12.2}$$

Der Gradient $\frac{\partial C}{\partial \eta}$ wird für den Punkt η_I (Brennerrohrwand) durch

$$\frac{\partial C}{\partial \eta} \simeq \frac{\frac{\rho_o \ \nu_o}{\rho_\infty \ \nu_\infty} - 1}{2\Delta\eta} \tag{12.3}$$

approximiert, in allen anderen Stützstellen der Anfangslinien gilt

$$\frac{\partial C}{\partial \eta} = 0 \tag{12.4}$$

Die dimensionslose Stromfunktion F läßt sich mit Hilfe von Gleichung (6.8) ausdrücken

$$F = \xi \int_0^\eta \frac{u}{\nu_\infty} \eta d\eta = a \int_0^\eta \frac{u}{\nu_\infty} \eta d\eta \qquad (12.5)$$

und durch numerische Integration einfach berechnen.

Die Größe $\bar{V}$ (Gleichung (6.18))

$$\bar{V} = \xi \frac{\partial F}{\partial \eta} + F$$

nimmt unter Beachtung von Gleichung (12.5) folgenden Anfangswert für $\xi = a$ an

$$\bar{V} = a \int_0^\eta \frac{u}{\nu_\infty} \eta d\eta + a \int_0^\eta \frac{u}{\nu_\infty} \eta d\eta$$

$$= 2F \qquad (12.6)$$

Für die rechten Seiten sowohl der Komponentenerhaltungsgleichungen (6.25) als auch der Elementenerhaltungsgleichungen (6.66) wird für alle Stützstellen der Anfangslinien Null vorgegeben. Dies ist ein angenehmer Nebeneffekt der in diese Gleichungen eingeführte fiktive Diffusion (vgl. Abschnitt 6.2.1), wodurch auch bei unendlich großen Konzentrationsgradienten die rechten Seiten der obengenannten Gleichungen den Wert Null annehmen.

Die Schrittweite in η-Richtung $\Delta\eta$ ist konstant und in den meisten Rechnungen wurden 140 Stützstellen verwendet. In Vorwärtsrichtung wird zu Beginn ein kleine $\Delta\xi$ gewählt, von dem langsam (in 10 - 20 Vorwärtschritten) auf die endgültige Schrittweite übergegangen wird.

Numerische Differentiation und Integration

In Querrichtung müssen mehrere Gradienten numerisch gebildet werden, so z.B. $\frac{\partial C}{\partial \eta}$, $\frac{\partial Y_i}{\partial \eta}$, $\frac{\partial \tilde{Y}_k}{\partial \eta}$, ebenso die Ableitungen der Diffusionterme in den Gleichungen (6.25) und (6.66). Dies geschieht mit 5-Punkte Formeln, die aus Lagrang'schen Interpolationspolynomen 4. Ordnung abgeleitet werden ([54],S.1168) In Vorwärtsrichtung stehen allerdings nur 3 Linien zur Verfügung. Deshalb wird der in Gleichung (6.18) auftretende Gradient $\frac{\partial F}{\partial \eta}$ mit Gleichung (6.44) bestimmt.

Numerische Integrationen sind nur in Querrichtung notwendig, z.B. bei der Bestimmung von $\hat{F}$ (Gleichung (6.20)). Dazu wird eine Kombination von Simpson und 3/8 Regel verwendet([55],S.236)

Unterrelaxation des Diffusionstromvektors

Anfänglich zeigten die Konzentrationslösungen ein starkes Schwingungsverhalten, das auf den großen Schwankungen des Diffusionsstromvektors (Gleichung (6.63)), zu dessen Berechnung 2. Ableitungen numerisch gebildet werden müssen, beruhte. Dieses instabile Verhalten der Lösungen konnte durch eine Unterrelaxation des Diffusionsstromvektors behoben werden, bei der nur eine 1o bis 20%-tige des Änderung des Diffusionsstromes zwischen zwei Iterationsschritten zugelassen wurde.

Lebenslauf

Geboren am 3. Juli 1949 in Münster

Schulen:	1956 - 1960	Volksschule in Münster
	1960 - 1971	Wilhelm-Hittorf-Gymnasium in Münster
	1971	Abitur
	WS 1971/72	Ruhr-Universität Bochum, Fachrichtung Maschinenbau
	Frühjahr 1977	Hauptdiplom

Berufsweg: Frühjahr 1977 bis Sommer 1977 wissenschaftliche Hilfskraft am Lehrstuhl für Experimentelle Gasdynamik. Ruhr-Universität Bochum.

Sommer 1977 wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Experimentelle Gasdynamik. Ruhr-Universität Bochum.

D. GRÄBNER
DISSERTATIONS U. OFFSETDRUCKEREI

Gotenstraße 3
8602 Altendorf bei Bamberg
Telefon: 09545/8791